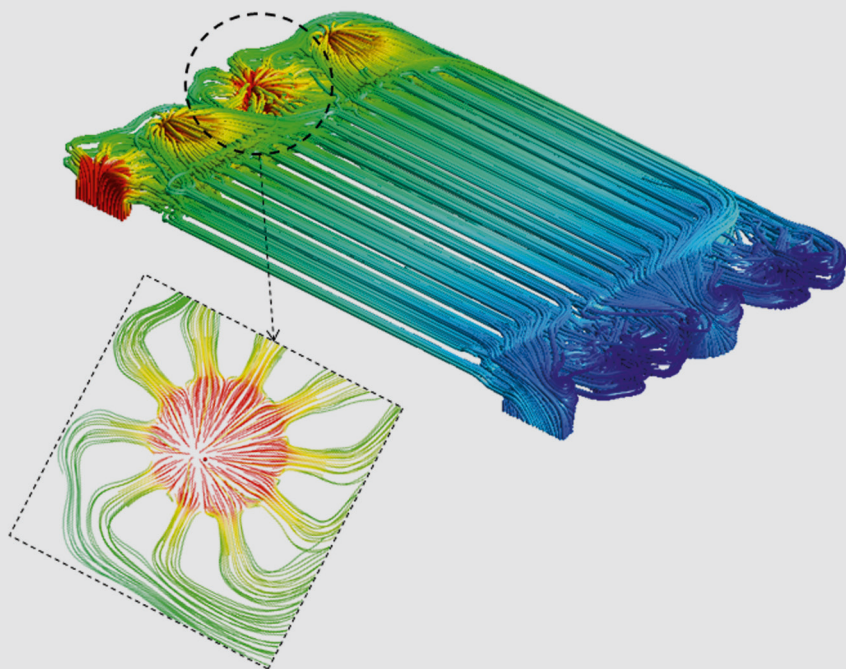
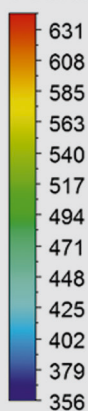


Numerische Modellierung der thermomechanischen Fluid-Struktur-Interaktion im SOFC-Stack

Ali Al-Masri

T-Streamlines [°C]



Energie & Umwelt /
Energy & Environment
Band/ Volume 33 1
ISBN 978-3-95806-161-3

Forschungszentrum Jülich GmbH
Institut für Energie- und Klimaforschung
Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3)

Numerische Modellierung der thermomechanischen Fluid-Struktur-Interaktion im SOFC-Stack

Ali Al-Masri

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment

Band / Volume 331

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-161-3

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek.
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte Bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Herausgeber
und Vertrieb: Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralbibliothek, Verlag
52425 Jülich
Tel.: +49 2461 61-5368
Fax: +49 2461 61-6103
E-Mail: zb-publikation@fz-juelich.de
www.fz-juelich.de/zb

Umschlaggestaltung: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Druck: Grafische Medien, Forschungszentrum Jülich GmbH

Copyright: Forschungszentrum Jülich 2016

Schriften des Forschungszentrums Jülich
Reihe Energie & Umwelt / Energy & Environment, Band / Volume 331

D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2016)

ISSN 1866-1793

ISBN 978-3-95806-161-3

Vollständig frei verfügbar über das Publikationsportal des Forschungszentrums Jülich (JuSER)
unter www.fz-juelich.de/zb/openaccess.



This is an Open Access publication distributed under the terms of the [Creative Commons Attribution License 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/),
which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Numerische Modellierung der thermomechanischen Fluid-Struktur-Interaktion im SOFC-Stack

von Ali Al-Masri

Kurzfassung

Die Festoxid-Brennstoffzellen „Solid Oxide Fuel Cells“ (SOFC) eignen sich für die Bordstromerzeugung als „Auxiliary Power Unit (APU)“ zur unterstützenden Bordstromversorgung in Nutzfahrzeugen. Für diese Anwendung müssen die Komponenten des Brennstoffzellen-Stacks aus dünnwandigem Material angefertigt werden, um die Herstellung in Leichtbauweise realisieren zu können. Dies ist mit Material-, Prozess- und Konstruktionsschwierigkeiten verbunden, deren Beseitigung eine Voraussetzung für einen erfolgreichen Einsatz ist. Bedingt durch die hohen Betriebstemperaturen ist die Kombination verschiedener Materialien in der SOFC nur eingeschränkt möglich, da die thermomechanischen Eigenschaften der verwendeten Werkstoffe angepasst werden müssen.

Thermische Spannungen werden infolge der Behinderung der Strukturverformung hervorgerufen. Dies kann durch mechanische Auflagerung, Materialinhomogenität oder ungleichmäßige Temperaturverteilung zustande kommen. Des Weiteren führen temperaturabhängige Materialeigenschaften durch die Existenz eines Temperaturgradienten zur zusätzlichen räumlichen Abhängigkeit der Materialparameter.

Basierend auf der computergestützten Simulationsberechnung ist das Ziel der vorliegenden Arbeit, ein dreidimensionales Gesamtmodell für die numerische fluiddynamische und thermomechanische Analyse eines SOFC-Stacks zu entwickeln. Das Gesamtmodell besteht aus zwei diskretisierten Einzelmodellen, die numerisch gekoppelt sind. Ein gekoppeltes fluiddynamisches Modell dient der Ermittlung der im Stack auftretenden räumlichen Temperaturverteilung unter realen Prozessbedingungen. Die berechneten Temperaturprofile werden als Last auf ein strukturmechanisches Finite-Elemente-Modell übertragen, um unter den gegebenen Auflagerungsbedingungen die in den Stack-Elementen hervorgerufene räumliche Spannungsverteilung und Deformation zu berechnen. Damit ermöglicht das Modell die Überprüfung der Tragfähigkeit und der Gebrauchstauglichkeit der Strukturelemente, um einen zuverlässigen Stack-Betrieb zu gewährleisten. Zur Durchführung der Simulationsberechnungen werden mehrere Module des Software-Pakets ANSYS eingesetzt.

Das Modell beschreibt einen zwei-Zeller-Stack und eignet sich zur Vorhersage des thermomechanischen Verhaltens der Struktur für den Einsatz in Bordstrom-Anwendungen unter Berücksichtigung der geometrischen Details der einzelnen Stack-Komponenten sowie des realen physikalischen Werkstoffverhaltens. Zur Beschreibung des nichtlinearen temperatur- und zeitabhängigen Materialverhaltens wurden entsprechende mathematische Materialmodelle aufgestellt, deren Parameter mit Hilfe experimenteller Daten bestimmt wurden. Die Modellvalidierung erfolgt durch den Vergleich der Berechnungsergebnisse mit experimentell ermittelten Daten.

Mit Hilfe des aufgestellten Modells lassen sich detaillierte Simulationsberechnungen durchführen, um die Auswirkungen von physikalischen Materialeigenschaften, Prozessrandbedingungen und geometrischen Designparametern auf die verursachten thermischen Spannungen zu untersuchen. Des Weiteren ermöglicht das Modell mit Hilfe von Optimierungsanalysen die Modifizierung der Einflussparameter zwecks Verbesserung der Funktionalität des SOFC-Stacks und Reduzierung der auftretenden thermischen Spannungen.

Numerical modeling of the thermomechanical fluid-structure interaction in a SOFC Stack

by Ali Al-Masri

Abstract

Solid oxide fuel cells (SOFC) are suitable for on-board electricity generation as Auxiliary Power Unit (APU) to support the electric power supply in heavy-duty vehicles. For these applications fuel cell stack must be made of thin-walled components in order to satisfy the requirements of a lightweight structure. This necessity is accompanied with material, process and design difficulties that must be solved in order to achieve a successful application. Due to the high operating temperatures, the combination of different materials in the SOFC is limited, as the Thermo-mechanical properties of the used materials must match.

Thermal stresses may arise in a structure as a result of preventing its deformation. This can be caused either by mechanical constraints, or material inhomogeneity, or non-uniform temperature distribution. Also temperature-dependent material properties can induce additional spatial dependency of the material parameters due to the existence of a temperature gradient.

The objective of this work is to develop a three-dimensional model for the numerical fluid dynamics and thermo-mechanical analysis of a solid oxide fuel cell stack based on computer aided simulations. The entire model consists of two discretized single models which are numerically coupled.

A coupled fluid-dynamic model is used to determine the three-dimensional temperature distribution in the stack under real process conditions. The obtained temperature profiles are transmitted as a thermal load to be applied on the structural finite element model to compute the three-dimensional distribution of the stresses and deformations induced in the fuel cell stack components. Thus, the model enables the investigation of sustainability and serviceability of the structural elements to ensure a reliable operation of the stack. To carry out the simulation analysis several modules of the software package ANSYS are utilized.

The model describes a two-cell stack and is suitable for predicting the thermomechanical behavior of the stack structure used in applications like on-board electric power generation. In the analysis the geometric details of fuel cell stack components as well as the real physical behavior of their materials are taken into account. To describe the nonlinear temperature and time-dependent material behavior, appropriate mathematical material models are set up. The Model parameters are determined using experimental data. The model validation is performed by comparing the computational results with the experimentally obtained data.

Using the developed simulation model, detailed computational analysis can be performed in order to determine the effects of the physical material properties and to investigate the process boundary conditions and the geometrical design parameters on the induced thermal stresses. Furthermore, based on optimization analysis, the model allows the modification of the influencing parameters in order to improve the function of the SOFC-Stack and reduce the thermal stresses.

1	Einleitung	1
1.1	Oxidkeramische Brennstoffzelle (SOFC)	1
1.2	Bordstromversorgung	2
1.3	Anforderungen der Bordstromversorgung	3
1.4	Aufgabenstellung und Zielsetzung	4
2	SOFC-Modellierung und –Simulation	7
2.1	Stand der Technik	7
2.2	Numerische Modellierungstechnik	13
2.3	Modellannahmen	15
2.3.1	Fluiddynamik und Thermomechanik	15
2.3.2	Elektrochemie	17
2.3.3	Wärmestrahlung	17
3	Fluiddynamische Analyse	19
3.1	Simulation des multiphysikalischen SOFC-Verhaltens	19
3.2	Aufstellung des 3-dimensionalen fluiddynamischen Modells	22
3.3	Überprüfung und Validierung des fluiddynamischen Modells	25
3.4	Überprüfung und Validierung des gekoppelten transienten Modellverhaltens	26
4	Thermomechanische Analyse	32
4.1	Einführung	32
4.2	Aufstellung des 3-dimensionalen thermomechanischen Modells	34
4.3	Überprüfung des thermomechanischen Modells	41
4.3.1	Definition der Randbedingungen	41
4.3.2	Materialmodelle	43
4.3.3	Kriechverhalten des ITM-Stahls	46
4.3.4	Feinheit des Rechnernetzes	50
4.3.5	Simulationsergebnisse	52
4.3.5.1	Thermische Dehnungen	52
4.3.5.2	Mechanische Verzerrungen	56
4.3.5.3	Spannungsverteilung	58
4.3.5.4	Verschiebungsfeld	61
4.3.6	Experimentelle Validierung des thermomechanischen Modells	65
4.3.7	Multistep-Submodeling-Technik	68

5	Modelleinsatz für Parameterstudien	74
5.1	Variation der Lastbedingungen und Materialkombinationen	74
5.2	Materialoptimierung	82
5.3	Einfluss des Temperaturgradienten auf die Spannung	87
6	Multiphysikalische Simulation eines Prozesszyklus	91
6.1	Einführung	91
6.2	Aufheizphase	93
6.2.1	Gekoppelte transiente fluiddynamische Analyse	93
6.2.2	Thermomechanische Analyse	98
6.2.2.1	Randbedingungen	98
6.2.2.2	Thermische Dehnungen	99
6.2.2.3	Mechanische Verzerrungen	101
6.2.2.4	Spannungsverteilung	103
6.2.2.5	Verschiebungsfeld	107
6.3	Betriebsphase	114
6.3.1	Gekoppelte stationäre fluiddynamische Analyse	114
6.3.2	Thermomechanische Analyse	115
6.3.2.1	Thermische Dehnungen	115
6.3.2.2	Mechanische Verzerrungen	116
6.3.2.3	Spannungsverteilung	117
6.3.2.4	Verschiebungsfeld	118
6.4	Abkühlphase	121
6.4.1	Gekoppelte transiente fluiddynamische Analyse	121
6.4.2	Thermomechanische Analyse	126
6.4.2.1	Thermische Dehnungen	126
6.4.2.2	Mechanische Verzerrungen	128
6.4.2.3	Spannungsverteilung	128
6.4.2.4	Verschiebungsfeld	130
6.5	Zusammenfassung der thermomechanischen Analyse	132
7	Optimierungsanalyse	136
7.1	Prozessoptimierung	136
7.1.1	Definition der Randbedingungen	136
7.1.2	Fallstudie A	138

Inhaltsverzeichnis

	7.1.3	Fallstudie B	140
	7.1.4	Fallstudie C	142
	7.1.5	Vergleich der Ergebnisse	144
	7.2	Design-Optimierung	148
8	Zusammenfassung	151
9	Literaturverzeichnis	155
10	Anhang	162
	10.1	Nomenklatur	162
	10.2	Abkürzungen	164
	10.3	Index-Schreibweise	165

1 Einleitung

1.1 Oxidkeramische Brennstoffzelle (SOFC „Solid Oxide Fuel Cell“)

Die SOFC ist eine Vorrichtung, die chemische Energie in elektrische Energie umwandelt und dabei Wärme als Nebenprodukt erzeugt. Durch den direkten Prozess der Energieumwandlung werden Verluste vermieden, die bei herkömmlichen thermischen und mechanischen Umwandlungsprozessen bei der Stromerzeugung auftreten können, wie es beispielsweise in Wärmekraftmaschinen der Fall ist. Aus diesem Grund können SOFCs in verschiedenen Anwendungen sehr effizient und umweltverträglich Strom und Wärme zur Verfügung stellen. Somit kann die SOFC als Generator sowie Batterie-Aufladegerät und möglicherweise als Batterieersatz dienen. Die Einzelzelle besteht aus den üblichen Komponenten, nämlich einer Anode, einem Elektrolyten und einer Kathode, wobei als Elektrolyt ein oxidionenleitendes Feststoffmaterial verwendet wird. Dabei wird der Brennstoff auf der Anodenseite durch Sauerstoffionen, die durch einen Elektrolyten aufgrund des chemischen Potentials geleitet werden, gemäß der Reaktion



oxidiert. Die frei gewordenen Elektronen fließen durch einen externen Stromkreis und gelangen zur Kathodenseite, wobei elektrische Arbeit verrichtet wird. Auf der Kathodenseite werden die Sauerstoffmoleküle zu Oxidionen gemäß der Reaktionsgleichung



reduziert. Der schematische Aufbau und das Arbeitsprinzip einer SOFC sind in Abbildung 1.1 dargestellt.

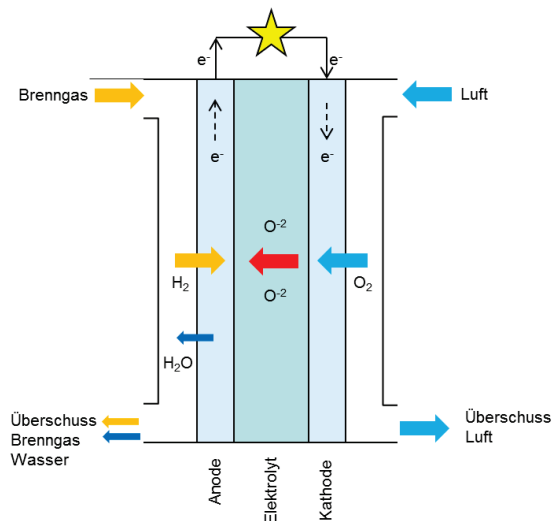


Abbildung 1.1: Funktionsweise der SOFC

In der Regel wird Luft als Sauerstofflieferant verwendet. Da die Sauerstoffionen erst ab sehr hohen Temperaturen im Elektrolyten beweglich sind, liegt die Betriebstemperatur zwischen 600°C und 1000°C. Der Elektrolyt ist gasdicht, um das Vermischen der Luft mit dem Brenngas zu verhindern, was zur Abnahme der elektrischen Betriebsspannung führen würde. Dagegen sind die Elektroden aus porösem Material, um die Diffusion der Gase aus den Kanälen zum Elektrode-Elektrolyt-Interface zu ermöglichen.

Verglichen mit anderen Brennstoffzellentypen hat die SOFC Vorteile durch die Variation des geometrischen Designs sowie die Auswahl der verwendeten Materialien, weshalb sie sich für verschiedene Einsatzbereiche sehr gut eignet. Weitere Vorteile der SOFC sind der hohe Wirkungsgrad, die Flexibilität der Brennstoffauswahl sowie der emissions- und geräuscharme Betrieb [1-12]. Weiterhin besteht die Möglichkeit, die bei hohen Betriebstemperaturen erzeugte Abwärme zu nutzen. Dieser Vorteil bewirkt eine Steigerung des Gesamtwirkungsgrads der Vorrichtung [1-5, 7-9, 13, 14]. Die Nachteile der SOFC sind hauptsächlich durch die hohen Betriebstemperaturen bedingt. Sie stellen zusätzliche Anforderungen an die Werkstoffe der Stack-Komponenten sowie an die Anpassung ihrer physikalischen Eigenschaften dar, um die Verträglichkeit des thermomechanischen Materialverhaltens zu sichern.

1.2 Bord-Stromversorgung

Steigende Aufmerksamkeit zieht die SOFC auf sich für mobile Anwendungen, insbesondere für den Einsatz als Auxiliary Power Unit (APU) zwecks Bordstromversorgung beispielsweise in LKWs und Nutzfahrzeugen. Im mobilen Bereich sind vor allem steigende Kilometerleistungen und die Reduzierung des spezifischen Kraftstoffverbrauchs bei gleichzeitiger Senkung der Emissionen Hauptthemen der Entwicklung. Speziell der hohe Stromverbrauch im Stillstand in solchen Fahrzeugen macht Technologien für die effiziente Bordstromerzeugung auf Basis derzeit verfügbarer Treibstoffe wie Diesel und Ethanol zu einem entscheidenden Gesichtspunkt im globalen Wettbewerb der Fahrzeughersteller. LKW-Bordstromversorgung auf SOFC-Basis kann verglichen mit im Leerlauf betriebenen Antriebsmotoren und Diesel-APU zu einer deutlichen Emissionsreduzierung beitragen.

Basis der Entwicklung einer Brennstoffzellen-APU für den Fahrzeugeinsatz ist die SOFC-Technologie. SOFC-APU-Systeme verfügen über die Möglichkeit, mit dem Kraftstoff des Verbrennungsmotors betrieben zu werden. Durch ihre Eignung für den Betrieb mit verschiedenen Brenngastypen sind keine komplexen und aufwendigen Reformierungsprozesse oder die Lagerung von Wasserstoff an Bord notwendig. Damit ist der Markteintritt nicht von der rechtzeitigen Verfügbarkeit einer flächendeckenden Infrastruktur eines neuen Kraftstoffes abhängig, sondern von der erfolgreichen technischen Umsetzung der APU.

Neben der Treibstoffflexibilität sind Hauptvorteile der SOFC-APU ihr vom Antriebsmotor des Fahrzeugs unabhängiger Betrieb und ihr hoher Wirkungsgrad. In dieser unterstützenden Funktion eignen sie sich für unterschiedliche Einsatzbereiche in verschiedenen Transportmitteln wie LKWs, Nutz- und Baufahrzeugen, Flugzeugen, Zügen und Schiffen. Zu den Anwendungen gehören:

- Klimatisierung
- Kühlgeräte
- Unterhaltungsgeräte

- Kommunikationsequipment
- Beleuchtung

Da die APU unabhängig vom Hauptantrieb funktioniert, wird dieser weniger belastet und kann folglich längere Lebensdauer erreichen. Ferner verfügen APU-Systeme über zusätzliche Vorteile wie den geräusch- und vibrationsarmen Betrieb sowie die geringere CO₂-Emission infolge des niedrigeren Kraftstoffverbrauchs. Weiterhin ermöglicht die modulare Bauweise die bedarfsorientierte Anpassung der Bordnetzspannung über die Anzahl der eingesetzten Zellen.

1.3 Anforderungen der Bordstromversorgung

Die Verwendung der SOFC-APU ist mit Material-, Prozess- und Konstruktionsschwierigkeiten verbunden, deren Beseitigung eine Voraussetzung für einen erfolgreichen Einsatz ist. Bedingt durch die hohen Betriebstemperaturen ist die Kombination verschiedener Materialien in der SOFC eingeschränkt, da die thermomechanischen Eigenschaften der Werkstoffe angepasst werden müssen. Dies führt zu Schwierigkeiten beim Fertigungsprozess, erhöht die Herstellungskosten und begrenzt die Gebrauchssicherheit.

Wie bereits beschrieben, basiert die APU auf der SOFC-Technologie, die als vielversprechend gilt. Trotz der oben genannten Vorteile, stößt die Technik auf Probleme im Zusammenhang mit dem fluiddynamischen sowie dem thermomechanischen Verhalten des APU-Stacks, die noch verbessert werden müssen. Für ein zuverlässiges und robustes APU-Stack-Design ist eine hermetische Abdichtung erforderlich, die Gasleckagen sowie eine Vermischung des Brenngases mit dem Oxidationsmittel innerhalb des Stacks verhindert und schließlich die Bestandteile der Brennstoffzelle verbindet. Zurzeit sind zwei verbreitete Abdichtungsarten im Gebrauch, die im Hinblick auf ihr Betriebsverhalten in starre und verformbare Abdichtungen aufgeteilt werden können. Verformbare Abdichtungen benötigen den Einsatz einer äußeren Presslast, während starre Abdichtungen, die aus Glas und Glaskeramik hergestellt werden können, mit den Komponenten des Stacks starr verbunden sind. Weiterhin sind sie flexibel im Design, kostengünstig und einfach zu fertigen. Die Schwierigkeit beim Einsatz der glaskeramischen Komponenten liegt in ihrer Empfindlichkeit gegenüber Zugspannungen. Insbesondere unter den thermomechanischen Lasten infolge der hohen SOFC-Betriebstemperaturen kann dies zum Verbundversagen führen.

Die Anforderungen an das APU-System leiten sich zunächst aus den Betriebsbedingungen der SOFC her. Zusätzliche Anforderungen ergeben sich aus dem mobilen Einsatzgebiet eines solchen Energieumwandlungssystems. Hierzu gehören:

- Geringeres Gewicht
- Kompaktheit
- Eignung für schnelles Aufheizen
- Brenngasflexibilität
- Mechanische Robustheit

Bei APU Anwendungen sind die Systemkomponenten und ihre Verbindungen hohen thermomechanischen zyklischen Belastungen ausgesetzt, da der Betrieb kurze Aufheizzeiten und wiederholtes An- und Ausschalten erfordert.

Um diese Anforderungen zu erfüllen, muss die Stack-Herstellung in Leichtbauweise realisiert werden. Folglich ist es erforderlich, die Stack-Komponenten aus dünnwandigem Material anzufertigen, was eine Herausforderung sowohl für das Design als auch für die Betriebsbedingungen darstellt. In Bezug auf die Tragfähigkeit können infolge kleiner Wandstärken der einzelnen Elemente hohe Spannungen auftreten, welche die Festigkeit der verwendeten Materialien übersteigen und somit das Versagen der betroffenen Komponenten oder des Verbundes verursachen. Weiterhin verringert sich die Steifigkeit der Struktur durch die kleinen Querschnittsflächen der dünnwandigen Elemente. Demzufolge erhält die Struktur eine höhere Flexibilität, die zu großen Deformationen führt. Ein solches Verhalten beeinträchtigt die Gebrauchstauglichkeit des Stacks aufgrund der Verformungsempfindlichkeit der Kontaktierung zwischen den Stack-Elementen. Damit verbunden ist ein weiteres Einsatzkriterium, nämlich die Kriechfestigkeit. Die zeitabhängigen Deformationen der Komponenten sind so gering wie möglich zu halten, um die Formstabilität zu gewährleisten. Wie in Abbildung 1.2 dargestellt, werden APU-Systeme für mobile Anwendungen in der Regel am LKW-Rahmen oder an der Fahrerkabine montiert. Folglich sind sie starken mechanischen Schwingungen ausgesetzt.

Basierend auf den oben genannten konstruktiven sowie werkstoff- und prozesstechnischen Anforderungen werden im folgenden Abschnitt die Aufgabe und das Ziel der vorliegenden Arbeit formuliert.



Abbildung 1.2: Delphi-SOFC-APU-System [15]

1.4 Aufgabenstellung und Zielsetzung

Um einen tiefgehenden Einblick in die thermomechanischen Prozesse während eines SOFC-Betriebszyklus erhalten zu können, sind detaillierte numerische Untersuchungen notwendig. Hierbei ist sowohl an die Analyse des gekoppelten fluiddynamischen als auch des strukturellen Verhaltens unter thermischer Belastung zu denken. Die gekoppelten numerischen Simulationen können dabei wertvolle Ergänzungen der experimentellen Untersuchungen darstellen und einige möglicherweise ersetzen. Gerade bei hohen SOFC-Temperaturen, unter denen Messungen sehr aufwendig beziehungsweise nur bedingt möglich sind, ist die numerische Modellierung unentbehrlich. Sie ermöglicht einen tieferen Einblick in den Charakter thermomechanischer Prozesse -insbesondere unter Berücksichtigung des nichtlinea-

ren temperatur- und zeitabhängigen Verhaltens der verwendeten Werkstoffe als dies bei experimentellen Untersuchungen aufgrund messtechnischer Schwierigkeiten erreichbar ist.

Hauptproblem beim Einsatz von SOFCs stellen Undichtigkeiten durch Rissbildung in Komponenten mit vergleichsweise niedriger Steifigkeit und Festigkeit dar, die infolge der hervorgerufenen inneren Spannungen in einigen Bereichen bedingt durch thermomechanische Überlastung auftritt. Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines 3D fluiddynamischen thermomechanischen Gesamtmodells zur Vorhersage des strukturellen Verhaltens eines SOFC-Stacks unter thermischer Belastung. Weiterhin dient das Modell der Untersuchung kritischer Stellen, wo Spannungsspitzen auftreten. Wesentliches Augenmerk soll hierbei auf hohen geometrischen und mathematischen Detaillierungsgrad gelegt werden. Das Modell berücksichtigt einen kompletten zwei-Zeller-Stack, der alle in der Praxis eingesetzten Komponenten aus unterschiedlichen Werkstoffen beinhaltet. Somit wird der Einsatz von vereinfachten Einzelkanalmodellen oder Modellen aus porösen Medien überflüssig. Die Berücksichtigung der dünnwandigen glaskeramischen Komponenten ermöglicht insbesondere die Analyse der Interaktion und 3D Visualisierung der unterschiedlichen Stack-Elemente. Auf der Basis gekoppelter multiphysikalischer numerischer Berechnungen mit Hilfe der 3D fluiddynamischen Berechnung und der nichtlinearen 3D Finiten-Elemente-Methode (FEM) wird das Strukturverhalten simuliert. Somit werden die multiphysikalischen Phänomene der Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) anhand von Temperaturfeldern eigenständig ermittelt und zur strukturellen Lösung angewendet. Auch das Materialverhalten wird auf Basis experimentell ermittelter Daten über den gesamten Betriebsbereich durch temperatur- und zeitabhängige nichtlineare mathematische Materialmodelle dargestellt. Dabei wird das Deformationsverhalten der gesamten Struktur unter Berücksichtigung der thermischen, elastisch-plastischen und zeitabhängigen Verzerrungen vollständig nichtlinear beschrieben. Aufbauend darauf soll für einen kompletten Zyklus bestehend aus Aufheiz-, Betriebs- und Abkühlphase die vollständige Spannungsverteilung ermittelt werden. Untersucht wird im Detail der Effekt von Prozess- und Materialparametern auf das thermomechanische Strukturverhalten. Ergebnisse dieser Untersuchungen sind Anhaltspunkte, die zeigen, in welchem Bereich und in welcher Phase die kritischsten Stellen vorliegen und die Aufstellung von Maßnahmen zu deren Beseitigung.

Die vorliegende Arbeit ist in 8 Kapitel aufgeteilt. Im ersten Kapitel wird auf die Einsatzgebiete und die entsprechenden Anforderungen der SOFC-Stacks für APU-Anwendungen eingegangen. Daraus werden die Aufgabenstellung und die Zielsetzung der Arbeit formuliert. Im zweiten Kapitel wird der Lösungsweg vorgestellt, welcher auf der Modellierungs- und Simulationstechnik basiert. Hierzu wird ein Überblick über die in der Literatur eingesetzten Berechnungsmodelle gegeben. Das dritte Kapitel beschäftigt sich mit der Aufstellung des fluiddynamischen Modells, welches für die Ermittlung der thermischen Last benötigt wird. Diese wird auf das im darauffolgenden Kapitel entwickelte thermomechanische Modell übertragen. Des Weiteren werden in diesem Kapitel die Materialmodelle aufgestellt, die das Deformationsverhalten des betrachteten SOFC-Stacks beschreiben. Die Validierung beider Modelle, die zusammen das Gesamtmodell bilden, erfolgt in den jeweiligen Kapiteln, in denen die Modelle aufgestellt werden. Hierzu wird das Verhalten der Berechnungsmodelle unter verschiedenen Lastbedingungen auf Plausibilität der ermittelten Ergebnisse überprüft und anschließend mit experimentellen Daten verglichen. Im Kapitel 5 wird mit Hilfe des Gesamtmodells eine Parameterstudie durchgeführt, um die Auswirkungen der Variation der Materialeigenschaften auf die im Stack hervorgerufenen Spannungen zu ermitteln. Im Kapitel 6 wird das thermomechanische Stack-Verhalten während eines Operationszyklus betrachtet, wobei die

verursachten Temperaturprofile und Temperaturgradienten ermittelt und anschließend die auftretenden Spannungsfelder analysiert werden. Zwecks der Reduzierung der im Glas hervorgerufenen Spannungen werden im darauffolgenden Kapitel mit Hilfe der Optimierungsanalyse die Auswirkungen der fluiddynamischen Randbedingungen und der Geometrie der Glasfügung auf die Spannungen untersucht. Zum Schluss werden die erzielten Berechnungsergebnisse im Kapitel 8 zusammengefasst. Die Struktur der Arbeit ist in Abbildung 1.3 schematisch dargestellt.

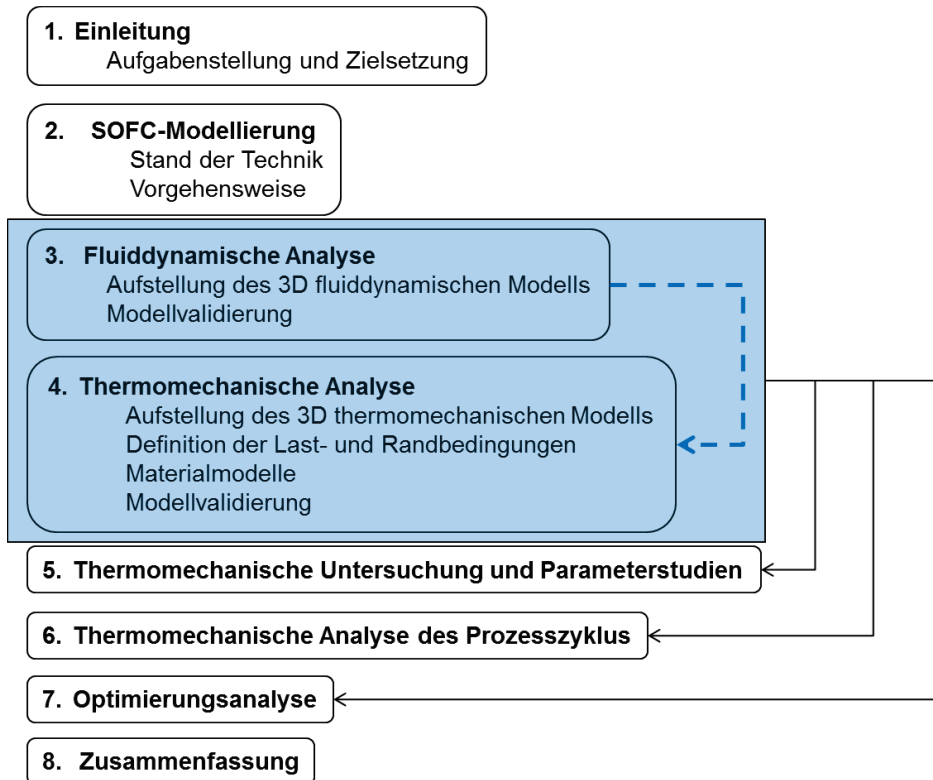


Abbildung 1.3: Struktur der Arbeit

2 SOFC-Modellierung und -Simulation

Bei der Herstellung komplexer Bauteile werden in der Regel zahlreiche Vorversuche durchgeführt, die häufig mit hohen Entwicklungskosten verbunden sind. Durch den Einsatz computergestützter Simulationstechnik lassen sich mehrere Vorteile gleichzeitig realisieren. Zum einen kann eine gezielte Strukturauslegung mit definierter Dimensionierung erreicht und folglich das Werkstoffpotential wesentlich besser ausgeschöpft werden. Zum anderen können sowohl die Effektivität der Entwicklung als auch die Bauteilqualität gesteigert werden, wobei Entwicklungszeiten und –kosten reduziert werden. Weiterhin können am Rechner neue Verfahrenstechniken entwickelt oder Werkstoffe optimiert und getestet werden, ohne hohe Kosten zu verursachen. Die eigentliche Stärke der Prozesssimulation liegt in der Möglichkeit der Parametervariation zur Beschleunigung des Entwicklungsprozesses.

In den letzten Jahren ist eine bedeutende Verbesserung im Design und in der Entwicklung der SOFC erzielt worden. Jedoch ist die strukturelle Zuverlässigkeit der eingesetzten Komponenten aufgrund ihrer geometrischen Komplexität durch die thermomechanische Beanspruchung eingeschränkt. Somit ist es während der Lebensdauer des SOFC-Stacks und seiner Komponenten von grundlegender Bedeutung, das thermomechanische Verhalten zu untersuchen und zu verstehen. Diese Herausforderung bedarf eines erheblichen experimentellen Aufwands, weshalb die Simulationsberechnung als alternative Technik angesehen wird. Im vorliegenden Kapitel wird auf den Einsatz der Simulationstechnik zur Beschreibung des thermomechanischen Stack-Verhaltens eingegangen. Nach einer Literaturstudie über die verwendeten SOFC-Modelle wird anschließend die numerische Modellierung mit Hilfe diskretisierter Modelle vorgestellt. Danach werden Modellannahmen getroffen, um den Berechnungsaufwand im Rahmen zu halten. Der folgende Beitrag zeigt den aktuellen Stand der numerischen Modellierung zur Vorhersage des Verformungsverhaltens von SOFC-Stacks infolge thermomechanischer Belastung.

2.1 Stand der Technik

Der Einsatz der Modellierungs- und Simulationstechnik im SOFC-Bereich ist weit verbreitet, wobei aufgrund des multiphysikalischen Charakters der stattfindenden Prozesse unterschiedliche Ziele verfolgt werden, die durch die elektrochemischen, gekoppelten fluidodynamischen oder strukturellen Vorgänge beeinflusst werden. Darüber hinaus liefert die Modellierung Auskunft über Feldgrößen, die das Verhalten des SOFC-Stacks beschreiben und deren Messung schwierig oder nicht möglich ist. Aufgrund der verschiedenen Designmöglichkeiten sowie durch den Einsatz verschiedener Werkstoffe und die Variation der Randbedingungen steigt die Notwendigkeit zur Vorhersage des SOFC-Verhaltens mit möglichst geringem Zeit- und Kostenaufwand [16-25]. Neben dem Stand der Technik in der SOFC-Modellierung wird auch das zukünftige Potential der Simulationsmethoden gezeigt, um das SOFC-Verhalten unter verschiedenen Prozessbedingungen zu untersuchen. Von besonderem Nutzen ist die Multiscale-Vorgehensweise, bei der Mikromodelle mit Makromodellen kombiniert werden, damit ein Ausgleich zwischen Berechnungsaufwand und Genauigkeit erreicht wird. Die Simulationstechnik stellt ein bedeutendes Tool zur Ermittlung der Temperaturverteilung im Stack dar, um die optimalen Prozessbedingungen zu ermitteln und somit hohe Temperaturgradienten zu vermeiden [26-31]. Ferner dient die Modellierung als begleitendes und ergänzendes Hilfsmittel dazu, experimentelle Beobachtungen zu interpretieren und zu verstehen und somit die Richtung für neue zukünftige Forschungsgebiete festzulegen [32-39]. Durch die Modellierungstechnik können komplexe Vorgänge transparenter

gemacht werden, indem mit Hilfe hohen mathematischen Aufwandes Strukturen analysiert werden, um die physikalischen Vorgänge naturgetreu abzubilden. Für die konstruktive Gestaltung und Optimierung in der Entwurfsphase ist der Einsatz der Simulationstechnik vorteilhaft, da in einem Modell die Anzahl der Einflussgrößen reduziert werden kann. Dadurch werden lediglich die Parameter betrachtet, die einer konstruktiven Bearbeitung tatsächlich zugänglich sind. Die mathematische Modellierung basierend auf der numerischen Fluidodynamik stellt eine umfassende und effektive Vorgehensweise zur Vorhersage des Designverhaltens unter verschiedenen sowohl stationären als auch transienten Randbedingungen dar. Numerische fluiddynamische Modelle werden zunehmend zur Charakterisierung und Entwicklung der SOFC eingesetzt. Sie ermöglichen die detaillierte Simulation der Wechselwirkungen zwischen den Strukturkomponenten und dem Fluid zwecks der Analyse des gekoppelten fluiddynamischen SOFC-Verhaltens, um die auftretenden Temperaturfelder zu ermitteln [40-46]. Eine der Hauptherausforderungen beim Einsatz der SOFCs stellt die Stack-Abdichtung dar. Diese besteht darin, die hermetische und strukturelle Zuverlässigkeit zu gewährleisten. Die Abdichtung muss sowohl mit unterschiedlichen Oxiden als auch mit den metallischen Komponenten der Zelle chemisch und mechanisch kompatibel sowie elektrisch isolierend sein. Außerdem muss das Abdichtungsmaterial den thermischen Lastzyklen während des Betriebs standhalten. Diese Voraussetzungen müssen erfüllt werden, da das Material infolge zyklischer thermomechanischer Belastung Ermüdung erfahren kann [47]. Ein ausführlicher Überblick über die Anforderungen an die Abdichtungselemente sowie gegenwärtige Technologien der entsprechenden Werkstoffe für den Einsatz in der SOFC ist in [48, 49] gegeben.

Die Bemühungen, die thermomechanische Stabilität der SOFC-Komponenten zu erhöhen, erstrecken sich über Forschungsfelder, in denen die numerische Modellierung eine besondere Rolle spielt. Unter den verschiedenen Berechnungsmodellen, die in der Literatur eingeführt werden, gewinnt die Untersuchung des fluiddynamischen Stack-Verhaltens zunehmend an Bedeutung [50-53]. Im Unterschied dazu wird weniger Aufmerksamkeit auf das thermomechanische Verhalten des SOFC-Stacks gerichtet. Um die Konkurrenzfähigkeit, Zuverlässigkeit und die dauerhafte Stabilität der Komponenten zu sichern, sind ein besseres Verständnis und eine geeignete Handhabung der einzelnen Stack-Elemente erforderlich.

In [54] wird eine dreidimensionale Berechnungsanalyse mit Hilfe eines einzelnen Einheitsmodells mit zweipoligen Kanälen vorgestellt. Das Einheitsmodell wird aus der Mitte eines vollständigen SOFC-Stacks gewählt, wobei die Randbedingungen zu den benachbarten Einheiten als adiabat angenommen werden. Das entsprechende Temperaturprofil wird sowohl für Gleich- als auch Gegenstromführung ermittelt. Dabei wird die fluiddynamische Berechnung mit Hilfe der kommerziellen Software STAR CD[®] durchgeführt und anschließend das Temperaturfeld zwecks strukturmechanischer Analyse auf ein FE-Netz appliziert. Für die thermomechanische Untersuchung wird das Programm ABAQUS[®] eingesetzt. In der Berechnung werden weder mechanische Randbedingungen entlang der Kanäle noch äußere Lasten berücksichtigt. Folglich werden lediglich die thermisch verursachten Dehnungen berechnet. Dabei werden die Spannungen im Elektrolyten und Interkonnektor ermittelt. Den Berechnungen entsprechend tritt ein steiler Abfall der Brenngastemperatur im Eingangsbereich auf, wodurch hohe Spannungen im Elektrolyten verursacht werden. Die in der Analyse verwendeten konstitutiven Gesetze und Materialeigenschaften werden nicht erwähnt.

Zwei weitere Studien werden in [55, 56] präsentiert, die sich mit den thermischen Spannungen in der Zelle beschäftigen. Die erste Publikation stellt eine numerische Analyse vor, um

die Eigenspannungen innerhalb des Elektrolyten vorherzusagen. Bei der Berechnung der Temperaturverteilung werden konstante thermische Randbedingungen zwischen den benachbarten Bauteilen angenommen. Weiterhin werden experimentelle Messungen durchgeführt, um die Berechnungsergebnisse zu überprüfen. Die zweite Studie beschäftigt sich mit der Verformung der Zelle infolge der Eigenspannungen sowie mit den Fertigungstechniken des Elektrolyten.

Eine gekoppelte thermomechanische Analyse der Zelle wird in [57] vorgestellt. In der Arbeit werden die thermischen Spannungen infolge der Temperaturgradienten sowie die Auswirkungen der unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten der Zellkomponenten untersucht. Für die Bestimmung der Stromdichte, Transport der chemischen Spezies und der Strömungseigenschaften in den Luftkanälen wird ein FORTRAN-Code eingesetzt. Die erhaltene Temperaturverteilung wird für die mechanische Analyse mit Hilfe der Software FEM-LAB[®] verwendet. Die mechanische Strukturanalyse wird lediglich für die Zellkomponenten durchgeführt, wobei die Interkonnektorplatten vernachlässigt werden. Weiterhin werden keine mechanischen Randbedingungen berücksichtigt. Für das Materialverhalten wird ein elastisches Modell angenommen, dessen Parameter der Literatur entnommen sind. Die Spannungen werden für den stationären und transienten Prozess ermittelt.

Bei einer numerischen Analyse wird in [58] der Einfluss der Temperaturverteilung auf das Spannungsfeld in den Komponenten einer Zelle in einem rohrförmigen SOFC-Design gezeigt. Im Vordergrund der Untersuchung steht die Auswirkung der Radialkomponente des Temperaturgradienten. Eine vereinfachte Weibull-Analyse wird durchgeführt, um die Wahrscheinlichkeit des mechanischen Versagens der Zellkomponenten sowohl im stationären als auch im transienten Prozess zu berechnen. Anhand der Sensitivitätsanalyse wird der Einfluss des Wärmeausdehnungskoeffizienten auf die hervorgerufenen Spannungen ermittelt. Die Berechnungen werden mit Hilfe der Software PROMS[®] und FEMLAB[®] durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass hohe Spannungen überall innerhalb der Anode und in der Umgebung der Kanten des Elektrolyten auftreten. Dies wird auf den Unterschied im Wärmeausdehnungskoeffizienten zurückgeführt. Weiterhin werden kritische Werte für die Beurteilung der Wahrscheinlichkeit des Bauteilversagens bestimmt.

Ein Abdichtungskonzept für planare SOFCs wird in [59] gezeigt. Mit Hilfe der FE-Berechnungen wird das strukturelle Verhalten einer nachgiebigen Verbundabdichtung analysiert. Die Spannungen in den einzelnen Komponenten werden berechnet und mit Werten der Bruch- und Fließspannungen aus Versuchsergebnissen verglichen. Für die Simulationsberechnung werden Tools der kommerziellen Software ANSYS[®] eingesetzt, wobei aufgrund der Symmetrie lediglich ein Viertel des Bauteils betrachtet wird. Es werden die Spannungen ermittelt, die infolge zyklischer thermischer Belastung zwischen hohen Temperaturen und Raumtemperatur auftreten. Angaben zu den eingesetzten Materialmodellen und deren Parametern sowie zu den Versagenskriterien und den mechanischen Randbedingungen werden nicht gemacht.

Die Berechnung der thermischen Spannungen in 3D für einen mehrzeller-SOFC-Stack wird in [60] durchgeführt. Die Verteilung der thermischen Spannungen im planaren Stack wird für verschiedene Prozessphasen einschließlich Betrieb und Abschaltung analysiert. Der Einfluss der unteren Strukturauflagerung, des Wärmeausdehnungskoeffizienten, der Temperaturprofile und des viskosen Verhaltens der betrachteten glaskeramischen Abdichtung werden untersucht. Der kommerzielle FEA-Code ABAQUS[®] wird für die Simulation verwendet, wobei die

Symmetrie der Struktur ausgenutzt wird, um den Berechnungsaufwand zu reduzieren. Mit dem Ziel eine realistische Temperaturverteilung zu berechnen, wird das thermo-elektrochemische Verhalten des Stacks während der Startphase und der stationären Betriebsphase berücksichtigt. Bei dieser Untersuchung wird die Gegenstromführung betrachtet. Die ermittelten Ergebnisse werden dann in das FEM-Programm eingelesen, um die strukturmekanische Analyse durchzuführen. Unterschiedliche mechanische Auflagerungsbedingungen werden getestet, damit eine Starrkörperbewegung des Stacks verhindert wird. Es wird angenommen, dass die Steifigkeit der eingesetzten glaskeramischen Komponente infolge des viskosen Verhaltens auf ein Drittel ihres Wertes sinkt. Für die bruchmechanische Analyse wird die Festigkeitsgrenze nach der Normalspannungshypothese angenommen, wobei als Materialkennwert die Bruchfestigkeit der glaskeramischen Komponente festgelegt wird. Dagegen wird die Fließspannung der Stahlkomponente als Grenzwert für das Versagen des Interkonnektors und des Rahmens nach der Schubspannungshypothese gesetzt. Die Berechnungen zeigen, dass die glaskeramische Komponente das am meisten bruchgefährdete Teil des untersuchten Stacks darstellt. In der Studie wird die Kommerzialisierung des Stacks als nicht realistisch eingeschätzt. Die Analyse stellt ein erstes Beispiel dar, in dem Glaskeramik bei der Berechnung berücksichtigt wird. Die Ergebnisse zeigen, dass die maximalen Spannungen um den Rand der Glasfügung und der Zelle auftreten.

In [61] wird eine weitere Studie vorgestellt, in der die Abdichtung nachgiebig ist. Unter thermischer Belastung wird das mechanische Verhalten der Zelle, der Abdichtung und der Rahmenteile auf der Basis von 3D FE-Modellen mit Hilfe des Software-Pakets ANSYS® analysiert. Das Gesamtbauteil wird gleichmäßig aufgeheizt und abgekühlt, wobei aufgrund der Symmetrie ein Viertel des Modells betrachtet wird. Weiterhin werden bei der Berechnung unter isothermen Randbedingungen für die Zelle die Materialeigenschaften der Anode eingesetzt. Für die Interkonnektorplatte wird ein bilineares elastisch-plastisches Materialgesetz aus der Literatur verwendet. Dagegen wird für das Abdichtungsmaterial ein elastisches Verhalten angenommen. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass während des Abkühlens lokales Beulen in der Zelle auftritt. Weiterhin ergeben die Berechnungen, dass die Spannungen im ersten thermischen Betriebszyklus höher sind als in einem weiteren.

In [62] werden drei unterschiedliche Designs von Verbundabdichtungen untersucht, die als nachgiebig gelten. Zur strukturmekanischen Analyse der Gesamtstruktur wird ein FE-Modell aufgestellt, das die Anode, den Rahmen und die Abdichtung beinhaltet. Für die Berechnung der Betriebs- und Abkühlphasen wird eine gleichmäßige thermische Last appliziert, wobei die gleichen Randbedingungen wie in der vorigen Studie sowie ein langsam aufheizender Ofen simuliert werden. Für die metallischen Komponenten wird ein bilinear kinematisch verfestigendes Materialmodell zugrunde gelegt. Dagegen wird für die Zelle ein elastisches Materialverhalten angenommen. Die Ergebnisse zeigen höhere Spannungen als erwartet, insbesondere bei der Verwendung von glaskeramischer Abdichtung.

Die Verteilung der thermischen Spannungen in einem dreizeller-SOFC-Stack wird in [63] untersucht. Interkonnektorplatten, Zelle, Rahmen, Nickelgitter und Glasabdichtung werden in einem 3D FE-Modell für die Analyse mit Hilfe des Programmes ABAQUS® berücksichtigt. Zur Ermittlung des Temperaturfeldes wird ein Gegenstrom-Modell eingesetzt. Die Tragfähigkeit der Struktur wird untersucht, wobei für die metallischen Komponenten das Tresca Kriterium und für die weiteren Bestandteile die Normalspannungshypothese als Versagenskriterium festgelegt werden. Weiterhin wird erläutert, dass die Spannungen in Zelle, Rahmen, Inter-

konnektorplatten und Nickelgitter hauptsächlich durch Material- sowie Temperaturgradienten entstehen.

Eine umfassende Studie, die sich mit der Untersuchung der thermischen Spannungen in SOFCs mit nachgiebigen Verbundabdichtungen beschäftigt, wird in [64] präsentiert. Eine Einheitszelle bestehend aus Einzelluft- und Einzelgaskanälen, Zelle sowie Interkonnektorplatten wird analysiert und das resultierende Temperaturfeld ermittelt. Unter der Annahme, dass der Temperaturgradient über den Interkonnektorplatten keine Komponente quer zur Strömungsrichtung besitzt, wird das Temperaturfeld auf die restlichen Kanäle der Platte erweitert. Für diese Untersuchung wird ein Gleichstrom-Design gewählt, wobei aus Symmetriegründen die Hälfte der Struktur betrachtet wird. Für die strukturelle Analyse werden 20 Einheitszellen berücksichtigt. Die Zelle, die aus einer Schicht mit den Eigenschaften der Anode besteht, verhält sich elastisch. Dagegen haben die metallischen Komponenten ein bilineares elastisch-plastisches Verhalten. Für die FEA wird die Software ANSYS® eingesetzt. Für die Validierung der Ergebnisse der thermischen Analyse werden Strom-Spannungs-Kurven verwendet. Es wird herausgefunden, dass das ungleichmäßige Temperaturfeld einen großen Einfluss auf die Spannungsverteilung hat. Die Auswirkungen des Temperaturgradienten auf die thermischen Spannungen in der nachgiebigen Abdichtung und in der glaskeramischen Abdichtung sind vergleichbar.

In [65] wird der Einfluss der schlagartigen Veränderung des Temperaturprofils auf die thermischen Spannungen in rohrförmigen SOFCs untersucht. Hierzu wird ein 2D FE-Modell mit Hilfe der Software COMSOL® analysiert. Dabei wird die freie thermische Ausdehnung nicht behindert und räumlich konstante Materialeigenschaften für bestimmte Temperaturniveaus verwendet. Der Einfluss der Temperatur und des thermischen Gradienten sowie der internen Reformierung (direkt und indirekt) werden analysiert. Die Ergebnisse zeigen einen starken Zusammenhang zwischen der Reformierungsmethode und der Spannungsverteilung. Weiterhin wird als Schlussfolgerung erwähnt, dass der Temperaturgradient in rohrförmigen SOFCs eine geringere Auswirkung auf die thermischen Spannungen hat.

In [66, 67] wird das Kriechverhalten von glaskeramischen Abdichtungen und Interkonnektorplatten von ein- und dreizeller-SOFC-Stacks in einem Modell mit Gegenstromführung untersucht. Aus den Ergebnissen geht hervor, dass langfristig Kriecheffekte der Glas- und Interkonnektorteile die Kanalabmessungen verändern. Für die FEA werden MSC Marc Mentat® Tools eingesetzt.

Eine Studie über das thermo-fluid-mechanische Verhalten in einer SOFC-Einzelzelle wird in [68] vorgestellt. Ein 3D-Modell mit einem zwischen zwei Aluminiumoxid-Gasverteilern integrierten Elektrolyten wird analysiert. Für die Simulation werden die CFD-Tools STAR-CD® und die FE-Software MSC Marc Mentat® verwendet. Die Ergebnisse zeigen, dass die thermischen Spannungen innerhalb der Zelle als Folge der Temperatur- sowie Materialgradienten durch unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten auftreten. Ein ähnliches Ergebnis wird auch in [63] erwähnt.

Weiterhin erfolgt in [69] eine thermofluidmechanische, thermomechanische Analyse mit Hilfe der Software COMSOL® für mikro-tubulare SOFC. Dabei werden thermische Spannungen betrachtet, die durch Zellenfertigung, äußere Behinderung der Verformung aufgrund der Auflagerung und Betriebszustände hervorgerufen werden. Ein rotationssymmetrisches 2D Modell wird präsentiert, in dem Aluminiumoxidröhre sowie Anode, Kathode und Elektrolyt integriert sind. Das ermittelte Temperaturfeld wird zur Vorhersage des thermomechanischen

Strukturverhaltens unter Berücksichtigung der Keramikabdichtung appliziert, wobei ein elastisches Materialverhalten angenommen wird. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass aufgrund der Wechselwirkung zwischen Zelle und der tragenden Struktur sowohl Druck- als auch Zugspannungen in einer Schicht auftreten können.

Das Patent [70] enthält die Beschreibung geometrischer Designparameter der SOFC-Komponenten, die das thermomechanische Strukturverhalten beeinflussen. Die Beziehungen zwischen den Parametern zeigen die Notwendigkeit des robusten und zuverlässigen geometrischen Designs. Des Weiteren wird in [71] eine Studie über die thermischen Spannungen und Rissentstehung in einem Modell eines dreizeller-SOFC-Stacks präsentiert. Das Modell besteht aus Anode, Elektrolyt und einer dünnen Zwischenschicht. Dabei werden Schubspannungen und Delamination mit Hilfe des Gesetzes von Paris untersucht. Im analysierten Modell werden die metallischen Komponenten und die Abdichtungen vernachlässigt. Ziel der Untersuchung ist die Ermittlung der Lebensdauer der Zelle unter verschiedenen thermischen Lastzyklen.

Eine systematische Vorgehensweise wird in [72] dargestellt, die eine Kombination aus experimentellen Messungen gekoppelt mit numerischen Analysen beinhaltet. Die Ergebnisse zeigen, dass kleine Temperaturgradienten zu Spannungsspitzen innerhalb des Stacks und im Wesentlichen im Manifold-Bereich führen. Weiterhin wird festgestellt, dass das Stack-Verhalten im Ofen nicht dem Verhalten im realen Betrieb entspricht.

In [73] wird eine gekoppelte 3D CFD/FEM Analyse eines SOFC-Stacks präsentiert. Die Ergebnisse zeigen eine ausführliche Übersicht über die in der Literatur verbreiteten Berechnungsmodelle und die Grenzen verschiedener Modellannahmen, wie beispielsweise realitätsnahe Kanalmodelle gegenüber Approximationsmodellen, in denen die Kanalbereiche durch entsprechende poröse Medien ersetzt werden. Ein solches fluiddynamisches 3D Modell wird in [74] vorgestellt, mit dessen Hilfe die transiente Aufheizphase eines SOFC-Stacks simuliert wird.

Meistens werden ferritische Stähle mit hohem Cr-Anteil für die metallischen SOFC-Komponenten des Rahmens und der Interkonnektorplatten verwendet. Der Werkstoff verfügt über die benötigte Resistenz gegen Kriechen [75]. Aus der Modellierungsansicht ist es von grundlegender Bedeutung, die Grenzen der geometrischen Modellvereinfachungen zu untersuchen und zu verstehen, da diese einen erheblichen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse haben. Somit könnten unzulässig vereinfachte Thermofluid-Modelle zu ungenauen Spannungsanalysen führen. Genauere Berechnungsergebnisse können durch den Einsatz erweiterter Simulationstechniken mit feiner und optimierter Vernetzung sowie höherer numerischer Auflösung verwendet werden [76-78]. Eine Zusammenstellung der in der Literatur existierenden Modelle wird in [79] gegeben, wobei die thermomechanische Analyse im Vordergrund steht.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die in der Literatur eingesetzten Modelle erhebliche Vereinfachungen beinhalten, die für fluiddynamische Analysen oder thermomechanischen Untersuchungen nur eingeschränkt verwendbar sind. Multiphysikalische Berechnungsmodelle, die realitätsnah sind und sowohl die Geometrie als auch das Materialverhalten und die wirkenden Randbedingungen berücksichtigen existieren noch nicht. Daher wird in der vorliegenden Arbeit ein 3D gekoppeltes fluiddynamisches sowie ein 3D thermomechanisches Modell entwickelt. Die Modelle berücksichtigen die multiphysikalischen Randbedin-

gungen und das reale Materialverhalten durch die Implementierung geeigneter Materialmodelle, die auf experimentell ermittelten Daten basieren.

2.2 Numerische Modellierungstechnik

Die mathematische Modellierung eines physikalischen Systems ist ein iterativer Prozess, mit dessen Hilfe durch Vereinfachung ein zum physikalischen System äquivalentes System aufgestellt wird. Dabei wird das Verhalten des physikalischen Systems mit Hilfe einer großen Anzahl von Parametern beschrieben. Durch das äquivalente System verringert sich die Anzahl der benötigten physikalischen Parameter auf einige Zustandsvariablen. Mit Hilfe der physikalischen Gesetze lässt sich aus dem äquivalenten System ein kontinuierliches Modell bilden, dessen Verhalten mit Hilfe partieller Differentialgleichungen beschrieben wird. Durch die Diskretisierung des kontinuierlichen Modells entsteht ein weiter vereinfachtes Modell mit endlicher Anzahl von Freiheitsgraden an den Knotenpunkten. Mit Hilfe des diskretisierten Modells lassen sich Näherungslösungen zum ursprünglichen System ermitteln. Die Vorgehensweise ist in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt.

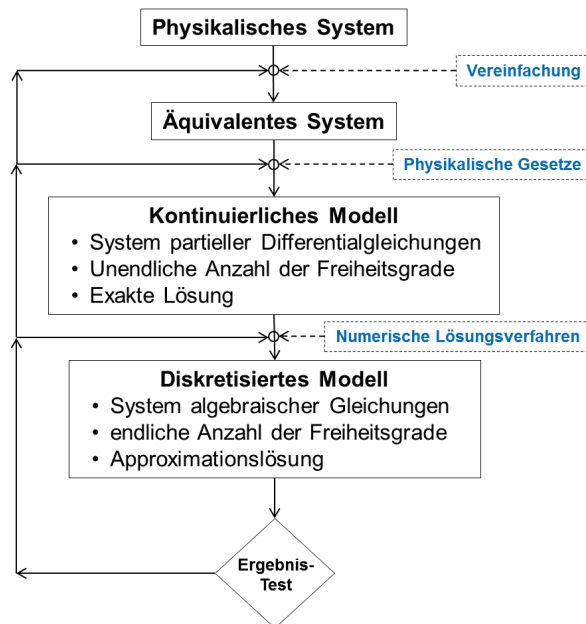


Abbildung 2.1: Prozess der mathematischen Modellierung

Die Merkmale des kontinuierlichen und des diskretisierten Modells sind in Abbildung 2.2 zusammengefasst und verglichen. Die Hauptunterschiede zwischen den beiden Modellen liegen in den angenommenen geometrischen und mathematischen Vereinfachungen. Diese führen zu einer Näherungslösung, die von der exakten Lösung abweicht.

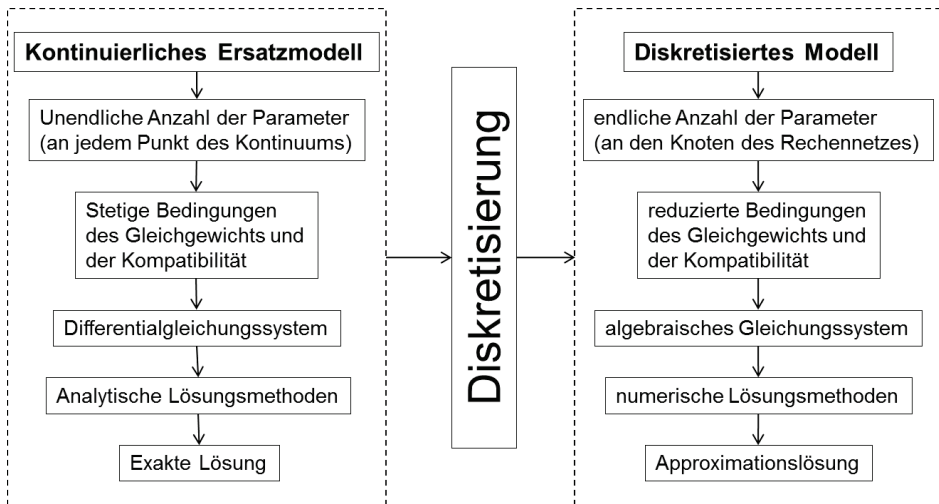


Abbildung 2.2: Diskretisierungsprozess

Daher ist es erforderlich die Vereinfachungen im Rahmen zu halten, damit die Abweichung im zulässigen Toleranzbereich bleibt. Die Vorgehensweise bei einer numerischen Lösung beinhaltet die folgenden Schritte:

Preprocessing

- Definition der Geometrie des betrachteten Berechnungsbereichs, in dem eine Lösung ermittelt werden soll
- Erzeugung eines Rechnetzes durch Unterteilung des Berechnungsbereichs in endlich große Elemente
- Festlegung der physikalischen Vorgänge im Modell
- Definition des Materialverhaltens
- Aufstellung geeigneter Randbedingungen für Elemente im Randbereich

Lösung

- Darstellung der unbekannten Feldvariablen durch geeignete Approximationsfunktionen
- Aufstellung der diskretisierten physikalischen Gleichungen durch Einsetzen der Approximationsfunktionen in die physikalischen Gleichungen
- Lösung des algebraischen Gleichungssystems

Postprocessing:

- Analyse und Interpretation der Ergebnisse
- Modellvalidierung

2.3 Modellannahmen

Bei der Lösung der thermomechanischen Aufgabe auf der Basis eines idealisierten Ersatzsystems oder Modells, sind bestimmte Vereinfachungen erforderlich, um einen Kompromiss zwischen der angestrebten Genauigkeit der Lösung und dem dafür benötigten Berechnungsaufwand zu finden. Die Zulässigkeit vereinfachender Modellannahmen wird hauptsächlich anhand der Validierung des Modells überprüft. Darauf wird in den Kapiteln 3 und 4 eingegangen, wo die aufgestellten Modelle für fluiddynamische und thermomechanische Analysen eingesetzt werden und ihr Verhalten mit experimentellen Daten oder bereits validierten Modellen verglichen wird. Wie bereits erwähnt, werden die geometrischen Details der Struktur berücksichtigt, da sie die Steifigkeit des Modells und folglich sein strukturelles Verhalten beeinträchtigen. Andere Annahmen beziehen sich auf die stattfindenden physikalischen Prozesse sowie deren Randbedingungen und basieren auf Angaben, die in der Literatur verbreitet sind.

2.3.1 Fluiddynamik und Thermomechanik

In der vorliegenden Arbeit wird die thermomechanische Aufgabe als quasi-statisch betrachtet, da die Trägheitseffekte infolge der zeitabhängigen Temperaturfelder vernachlässigbar sind. Dementsprechend werden zu verschiedenen Zeitpunkten die Spannungen ermittelt, die infolge thermischer Last hervorgerufen werden und durch das herrschende Temperaturfeld zum betrachteten Zeitpunkt definiert sind. Zu diesem Zweck werden die Temperaturprofile zunächst aus der numerischen fluiddynamischen Analyse zu den entsprechenden Zeitpunkten ermittelt und anschließend als thermische Last auf das FE-Modell der Stack-Struktur appliziert.

Aufgrund des Wärmeaustauschs zwischen den strömenden heißen Fluiden und dem Festkörper müssen die Gleichungen der Strömungsmechanik mit der Energiegleichung gekoppelt werden. Folglich ist die fluiddynamische Analyse als gekoppelt zu betrachten. Im Gegensatz dazu werden die strukturelle Analyse und die Wärmeübertragungsanalyse entkoppelt, da die vorliegenden Aufheizgeschwindigkeiten nicht zu einem Wärmeschock führen, wie im Folgenden beschrieben.

Lokale Temperaturänderungen relativ zur spannungsfreien Referenztemperatur verursachen lokale thermische Dehnungen, die im elastischen Körper lokale Spannungsvariationen hervorrufen. Diese breiten sich innerhalb des Körpers in Form elastischer Wellen aus. Folglich kann die Zeit t_m der Wellenausbreitung als charakteristische Zeit angesehen werden, die in der Form

$$t_m \approx \frac{l}{\sqrt{E/\rho}} \quad (2.1)$$

abgeschätzt werden kann. In dieser Beziehung bezeichnen E , ρ und l jeweils das Elastizitätsmodul, die Dichte und eine charakteristische Länge des betrachteten Festkörpers. Eine entsprechende Abschätzung der Zeit t_w , die für den Transport der Wärme im Festkörper benötigt wird, ergibt sich aus dem Fourier Gesetz der Wärmeleitung gemäß

$$t_w \approx \frac{\rho * c * l^2}{\lambda} \quad (2.2)$$

wobei c und λ jeweils spezifische Wärmekapazität und die Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers darstellen. Es ist deutlich zu erkennen, dass im Allgemeinen

$$\frac{l}{\sqrt{E/\rho}} \ll \frac{\rho * c * l^2}{\lambda} \quad (2.3)$$

gilt und somit

$$t_m \ll t_w \quad (2.4)$$

ist. Anhand der vorigen Betrachtung lässt sich feststellen, dass sich die Variation der Spannungen und Dehnungen, die durch lokale Temperaturen verursacht werden, schneller ausbreiten als die Variation der Temperatur infolge der Wärmeleitung. Aus diesem Grund werden die beiden physikalischen Prozesse entkoppelt und getrennt voneinander betrachtet. Dementsprechend wird die thermomechanische Analyse in zwei Schritten durchgeführt [80, 81, 82]:

- Ermittlung der Temperaturverteilung im Körper mit Hilfe der fluiddynamischen Analyse
- Durchführung der thermomechanischen Analyse mit der ermittelten Temperatur als Last.

Den vorigen Erläuterungen entsprechend sind zur Lösung der vorliegenden Aufgabe zwei Berechnungsmodelle erforderlich:

- Ein gekoppeltes fluiddynamisches Modell zur Ermittlung der Temperaturverteilung
- Ein strukturelles Modell zur Berechnung der durch die thermische Last verursachten Spannungen

Während das fluiddynamische Modell auf der Finiten Volumen Methode (FVM) basiert, wird zwecks der thermomechanischen Analyse die Finiten Elemente Methode (FEM) eingesetzt [83]. Des Weiteren unterscheiden sich beide Modelle dadurch, dass das fluiddynamische Modell aufgrund höherer Gradienten der Feldgrößen feiner diskretisiert sein muss. Die Vorgehensweise ist in Abbildung 2.3 schematisch dargestellt.

Des Weiteren wird zur Ermittlung der numerischen Lösungen das Software-Paket ANSYS eingesetzt. Für die Behandlung der jeweiligen Aufgabe stehen Module der numerischen Fluidmechanik CFX und der numerischen Strukturmechanik ANSYS-APDL zur Verfügung.

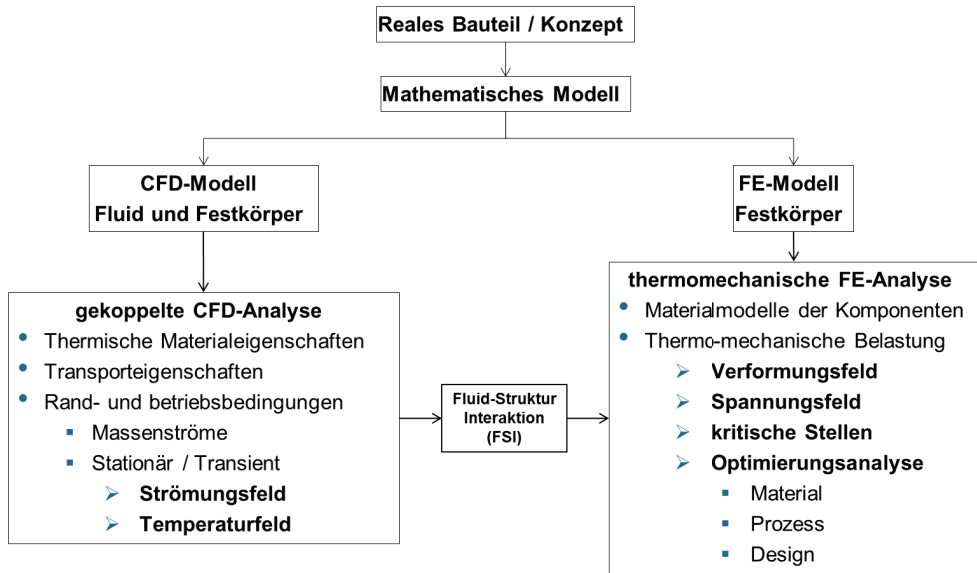


Abbildung 2.3: Ablauf der Simulationsberechnung

2.3.2 Elektrochemie

Eine weitere Modellannahme bezüglich der stattfindenden elektrochemischen Vorgänge während der Betriebsphase muss noch getroffen werden, da diese Prozesse die Temperaturverteilung im Stack beeinflussen. In der Literatur wird über die Ermittlung des Temperaturprofils in SOFCs berichtet, wobei abhängig von der Geometrie und der Konfiguration sowie der betrachteten Berechnungsdimension verschiedene Methoden eingesetzt werden [84, 85]. Die in der Einzelzelle produzierte Abwärme kann durch Wärmequellen ersetzt werden, die ortsabhängig mit Hilfe von einfachen 1D elektrochemischen Modellen ermittelt werden [86-89]. Diese Vereinfachung stellt eine erhebliche Reduzierung des Berechnungsaufwands dar [90-93]. In der vorliegenden Arbeit wird die durch elektrochemische Vorgänge erzeugte Wärme durch die Implementierung von Wärmequellen im Modell simuliert. Diese Vereinfachung zeigt sich als sinnvoll, da die Temperaturverteilung im SOFC-Stack während der Betriebsphase homogener als in den anderen Prozessphasen ist. Des Weiteren ist die Differenz zwischen den lokalen Stack-Temperaturen und der spannungsfreien Referenztemperatur geringer. Dies führt dazu, dass die thermischen Spannungen während der Betriebsphase viel niedriger als in den anderen Prozessphasen sind. Daher ist die getroffene Vereinfachung bezüglich der elektrochemischen Prozesse vertretbar.

2.3.3 Wärmestrahlung

Die Wärmestrahlung bewirkt im Allgemeinen eine Vergleichmäßigung des Temperaturfeldes. Dennoch ist ihre Berücksichtigung in der Simulationsberechnung mit großem Aufwand verbunden. In der Literatur existieren mehrere Studien, in denen die Wärmestrahlung vernachlässigt wird [92, 93]. Der Einfluss der Wärmestrahlung in der Zelle wird in [94] mit Hilfe von zwei Modelltypen untersucht. Während im ersten Modell die Wärmestrahlung nicht berücksichtigt wird, beinhaltet das zweite Modell eine Kopplung zwischen Wärmeleitung und Wärmestrahlung. Durch den Vergleich der Berechnungsergebnisse beider Modelle wird ge-

zeigt, dass die Wärmeübertragung durch Strahlungsmechanismen einen vernachlässigbar kleinen Effekt auf das ermittelte Temperaturfeld haben und eine fluiddynamische SOFC-Analyse ohne Berücksichtigung der Wärmestrahlung durchgeführt werden kann. Weiterhin wird in [54] berichtet, dass Wärmestrahlung in den Luft- und Brenngaskanälen der SOFC verglichen mit den anderen Wärmeübertragungsmechanismen einen sehr geringen Einfluss auf die Temperaturverteilung haben. Über ähnliche Ergebnisse wird in mehreren Arbeiten berichtet [95-97]. Um den Berechnungsaufwand zu reduzieren, wird dementsprechend die Wärmestrahlung auch in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt.

Die getroffenen Modellannahmen dienen zur Vermeidung vom überflüssigen Rechenaufwand. Die erwähnten fluiddynamischen Modellannahmen erweisen sich anhand der experimentellen Temperaturmessungen im Rahmen der Arbeiten in [93] als zulässig. Die Messungen wurden während der verschiedenen Phasen eines Prozesszyklus und an mehreren Orten des SOFC-Stacks durchgeführt. Dabei wurde eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Messergebnissen und den Simulationsberechnungen festgestellt.

3 Fluiddynamische Analyse

3.1 Simulation des multiphysikalischen SOFC-Verhaltens

Wie bereits im vorigen Kapitel erläutert, wird die thermomechanische Aufgabe als quasi-statisch betrachtet. Dementsprechend werden zu verschiedenen Zeitpunkten die Spannungen ermittelt, die infolge thermischer Last hervorgerufen werden. Diese sind durch die zum betrachteten Zeitpunkt lokal herrschende Temperatur definiert. Demgemäß werden die Temperaturprofile zunächst aus der gekoppelten fluiddynamischen Analyse zu den entsprechenden Zeitpunkten ermittelt und anschließend als thermische Last auf die materiellen Punkte der Stack-Struktur appliziert. Das zu diesem Zweck erforderliche fluiddynamische Modell wird in diesem Kapitel aufgestellt und unter verschiedenen Randbedingungen getestet und validiert.

Die Vorhersage des makroskopischen multiphysikalischen SOFC-Verhaltens erfordert den Einsatz geeigneter mathematischer Modelle, die ein sehr wichtiges Werkzeug darstellen, mit dessen Hilfe der Einfluss verschiedener Material- und Prozessparameter untersucht werden kann. Die Simulationsergebnisse dienen der Optimierung der Materialeigenschaften, des Designs sowie der Prozessrandbedingungen. Makroskopisch betrachtet, basiert der multiphysikalische Charakter der Prozesse, die in einem SOFC-Stack stattfinden, auf den physikalischen Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie. Dabei werden die Festkörperbereiche eines SOFC-Stacks als Kontinuum angesehen, für die an jedem materiellen Punkt des betrachteten Bereichs die physikalischen Erhaltungssätze gemäß der Lagrange-Betrachtungsweise erfüllt sein müssen. Die Gasbereiche werden ebenfalls als Kontinuum angesehen, wobei die physikalischen Größen des betrachteten Gasbereichs gemäß der Euler-Betrachtung an jedem Punkt des dreidimensionalen Raums zu erfüllen sind. Somit sind die physikalischen Größen beider Bereiche durch partielle Differentialgleichungen gekoppelt. Zur Beschreibung des Kontinuumsverhaltens stehen die genannten physikalischen Erhaltungssätze zur Verfügung. Bei der Aufstellung der Gleichungen wird die Index-Schreibweise verwendet, da sich dadurch die Gleichungen in einer kompakten Form darstellen lassen. Dabei beziehen sich die Indizes auf die Richtungen des dreidimensionalen Kartesischen Raums x_1, x_2, x_3 , weshalb die in den Gleichungen auftretenden Indizes die Werte 1, 2, 3 annehmen können. Ferner wird die partielle Ableitung nach der i -ten Koordinate durch ein Komma vor dem Index gemäß

$$\frac{\partial}{\partial x_i} () = ()_{,i} \quad (3.1)$$

gekennzeichnet. Somit ergibt sich für den Massenerhaltungssatz der Zusammenhang

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\rho v_i)_{,i} = 0, \quad (3.2)$$

wobei ρ die Dichte und v_i die Komponente des Geschwindigkeitsvektors in der Koordinatenrichtung x_i darstellen.

Weiterhin gilt die Einstein'sche Summationsvereinbarung, wonach über gleiche in einer Gleichung auftretende Indizes summiert wird, wie die nachfolgende Gleichung für die beliebigen Variablen a und b beschreibt.

$$\sum_{i=1}^3 a_i * b_i = a_i * b_i = a_1 * b_1 + a_2 * b_2 + a_3 * b_3 \quad (3.3)$$

Der Impulssatz wird durch die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + (\rho v_j v_i)_{,j} = \sigma_{ji,j} \quad (3.4)$$

definiert. Darin bezeichnen ρ die Dichte und v_i die Komponente des Geschwindigkeitsvektors in x_i -Richtung. Die rechte Seite der Gleichung (3.4) stellt die Divergenz des Spannungstensors dar, der an einem infinitesimalen Element des Kontinuums wirkt, wobei es sich beim Kontinuum sowohl um ein Fluid als auch um einen Festkörper handeln kann. Ferner werden in der oben gegebenen Impulsgleichung die Volumenkraft, wie die Gewichtskraft, vernachlässigt. Für den Festkörper, der sich in Ruhe befindet, verschwindet die linke Seite der Gleichung und man erhält für die Divergenz des Spannungstensors die Beziehung

$$\sigma_{ji,j} = 0_i, \quad (3.5)$$

die das Gleichgewicht des Kontinuums beschreibt.

Für ein Fluid wird der Spannungstensor, der infolge der Gelichheit paarweise zugeordneter Schubspannungen Symmetrieeigenschaften besitzt, in einen Kugeltensor und einen Deviator gemäß

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (3.6)$$

zerlegt. In Gleichung (3.6) stellt der erste Term auf der rechten Seite den Kugeltensor dar, wobei ein Minuszeichen eingeführt wurde, damit p mit dem wirkenden thermodynamischen Druck übereinstimmt. Ferner wird der Deviator τ_{ij} auch als Reibungsspannungstensor bezeichnet. Das Kronecker-Symbol δ_{ij} stellt einen Einheitstensor dar, für den der Zusammenhang

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (3.7)$$

gilt. Wird Gleichung (3.6) in (3.4) eingesetzt, so ergibt sich die in der Literatur verbreitete Form des Impulserhaltungssatzes, die auch als Cauchy-Gesetz bezeichnet wird.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) + (\rho v_j v_i)_{,j} = (-p\delta_{ji} + \tau_{ji})_{,j} \quad (3.8)$$

Der Energieerhaltungssatz ist durch die Gleichung

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + v_i h_{,i} \right) = \frac{\partial p}{\partial t} + (\tau_{ji} v_i)_{,j} - q_{i,i} \quad (3.9)$$

gegeben, wobei h die spezifische Enthalpie und q_i die Komponente des Wärmeflussvektors in x_i -Richtung bezeichnen. Für die Enthalpie gilt der Zusammenhang

$$h = e + \frac{p}{\rho}, \quad (3.10)$$

in dem e die spezifische innere Energie im betrachteten Lösungsbereichs darstellt. Aus den physikalischen Bilanz- bzw. Erhaltungsgleichungen ergeben sich 5 skalare partielle Differentialgleichungen (Kontinuitätsgleichung, Energiegleichung, 3 Impulsgleichungen in den entsprechenden Koordinatenrichtungen). Im Gleichungssystem treten insgesamt 15 unbekannte Feldgrößen auf, die im Allgemeinen orts- und zeitabhängig sind, wobei aufgrund der Symmetrie des Reibungsspannungstensors sechs seiner neun Komponenten unabhängig sind.

ρ	1 Komponente	skalare Größe
p	1 Komponente	skalare Größe
e	1 Komponente	skalare Größe
v_i	3 Komponenten	vektorielle Größe
q_i	3 Komponenten	vektorielle Größe
τ_{ij}	6 Komponenten	symm. Tensor 2.Ordnung

Es ist erkennbar, dass die Lösung einer multiphysikalischen Aufgabe zusätzlicher Gleichungen bedarf, die sich aus den materialabhängigen konstitutiven Gesetzen ableiten lassen und das rheologische Verhalten des Kontinuums beschreiben. Der Zusammenhang zwischen Schubspannung und Verzerrungsrate im Fluid stellt eine solche Beziehung dar, wie die Gleichung (3.11)

$$\tau_{ij} = \mu e_{kk} \delta_{ij} + 2\eta e_{ij} \quad (3.11)$$

zeigt. Für die Verzerrungsrate gilt der Zusammenhang

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (v_{i,j} + v_{j,i}), \quad (3.12)$$

der auf den kinematischen Kompatibilitätsbedingungen des Kontinuums basiert. In Gleichung (3.11) beschreiben die Materialparameter μ und η die Lamé-Viskositäts-Konstanten des Fluides. Die Gleichung ist eine Verallgemeinerung der Beziehung

$$\tau = \eta \dot{\gamma}, \quad (3.13)$$

die das Verhalten einer Newtonschen Flüssigkeit im eindimensionalen Fall beschreibt. Die Beziehung zwischen dem Wärmeflussvektor und dem Temperaturgradienten liefert eine weitere konstitutive Gleichung gemäß

$$q_i = -\lambda T_{,i}, \quad (3.14)$$

die als Fouriersches Gesetz bekannt ist. Neben dem Materialparameter λ , der die Wärmeleitfähigkeit des Kontinuums beschreibt, bringt die Gleichung (3.14) die Temperatur T als eine zusätzliche thermodynamische Feldgröße mit. Somit steigt die Anzahl der Unbekann-

ten auf 16. Dennoch liefern die Zustandsgleichungen gemäß den funktionalen Zusammenhängen

$$p = p(\rho, T) \quad (3.15)$$

und

$$e = e(\rho, T) \quad (3.16)$$

weitere Beziehungen zur Lösung der multiphysikalischen Aufgabe. Für ein ideales Gas nehmen die Zustandsgleichungen die Form

$$p = \rho RT \quad (3.17)$$

und

$$e = c_v T \quad (3.18)$$

an, wobei R die universelle Gaskonstante und c_v die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen darstellen. Durch die konstitutiven Gleichungen und die Zustandsgleichungen liegen so viele Gleichungen vor wie Unbekannte zur Lösung der multiphysikalischen Aufgabe und somit ist die Aufgabe unter vorgegebenen Rand- und Anfangsbedingungen lösbar. Allerdings ist eine analytische Lösung nur in einfachen Fällen bekannt, weshalb man im Allgemeinen auf numerische Lösungsverfahren angewiesen ist.

3.2 Aufstellung des 3-dimensionalen fluiddynamischen Modells

Ziel der gekoppelten fluiddynamischen Analyse ist die Ermittlung der Temperaturverteilung im Stack unter vorgegebenen Randbedingungen, die den realen Prozessbedingungen entsprechen. Diese können, abhängig von der betrachteten Prozessphase, stationär oder transient sein. Bei transienten Prozessphasen, wie Aufheizen oder Abkühlen, ist es erforderlich, das Temperaturfeld in Abhängigkeit von Ort und Zeit in der Form

$$T = T(x_1, x_2, x_3, t) \quad (3.19)$$

zu bestimmen. Die Temperaturdifferenz ΔT mit

$$\Delta T = T - T_{ref} \quad (3.20)$$

relativ zu einer spannungsfreien Referenztemperatur T_{ref} verursacht thermische Dehnungen, deren Behinderung zu Spannungen führt. Somit bildet das ermittelte Temperaturprofil die thermische Last, die den Stack beansprucht. Da die strömungsmechanischen Gleichungen mit der Energiegleichung gekoppelt sind, umfasst das fluiddynamische Modell die Bereiche des Festkörpers und der strömenden Gase, in denen der Wärmeaustausch stattfindet. Die 3D Stack-Struktur enthält alle Komponenten, die in einem realen SOFC-Stack eingesetzt werden, um das entsprechende thermo-mechanische Verhalten der Struktur abzubilden. Für die Durchführung der Analyse wird ein 2-zeller-Stack betrachtet, der in Abbildung 3.1 dargestellt ist. Die Stack-Geometrie in Abbildung 3.1 bildet das kontinuierliche Modell und ist somit die Basis für das diskretisierte Modell.

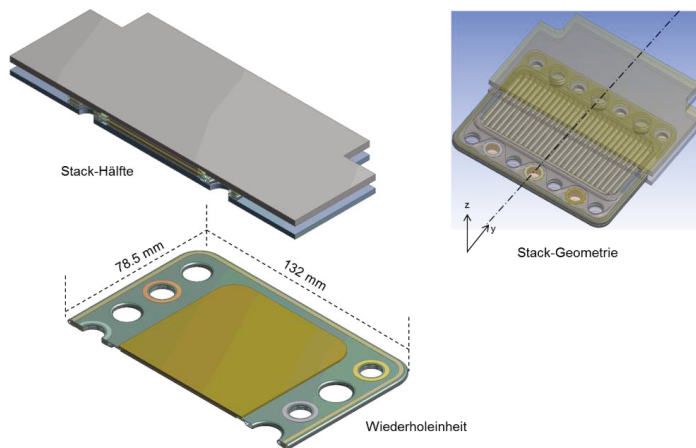


Abbildung 3.1: Aufbau des SOFC-Stacks

In der vorliegenden Arbeit wird ein SOFC-Stack betrachtet, der aus planaren metallgestützten Einzelzellen besteht. Bei der Einheitszelle handelt es sich um eine metallsubstratgestützte Zelle mit einer Fläche von 84 cm^2 . Die metallgestützte Zelle verfügt über höhere mechanische Steifigkeit, gute elektrische Leitung und verbesserte Wärmeverteilungsfähigkeit. Durch die metallische Verstärkung erhält die Zelle höhere Strukturstabilität und somit besseres mechanisches Verhalten, was für mobile Anwendungen als APU zwecks Bord-Stromerzeugung erforderlich ist. Des Weiteren eignet sich die metallgestützte Zelle für den Einsatz konventioneller Verbindungsverfahren, wie die Schweißtechnik, zwecks Zusammenfügens der Stack-Elemente. Die Stack-Komponenten Ober- und Unterschale sowie das poröse Zellensubstrat sind aus „Intermediate Temperature Metal“ (ITM), einem hochfesten Stahl der Firma Plansee. Die Blechelemente sind geprägt und haben eine Wandstärke von 0.3 mm. Die Abdichtung der Kassetten erfolgt mit Hilfe der am Forschungszentrum Jülich entwickelten Glas-Keramik-Fügung G87. Um den Berechnungsaufwand zu reduzieren, wird die Symmetrie der Struktur genutzt und die Hälfte des Modells berücksichtigt. Ferner besteht eine Einheitszelle des 2-Zeller-SOFC-Stacks aus den folgenden Komponenten:

- Ober- und Unterschale
- Zelle mit Metallsubstrat
- Ringrahmen (Stützende Elemente)
- Glasabdichtung
- Grund- und Deckplatte

Die Explosionszeichnung in Abbildung 3.2 zeigt die einzelnen Komponenten, die in der betrachteten Struktur verwendet werden und bei einem mehrzeller-Stack eine sich wiederholende Einheit „repeating unit“ bilden.

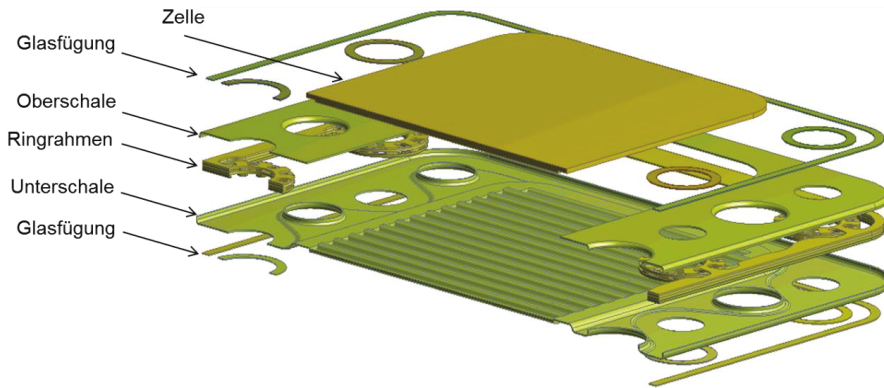


Abbildung 3.2: Explosionszeichnung der Kassette

Zwei Einheitszellen mit oberer und unterer Anschlussplatte bilden den kompletten Stack. Die einzelnen Komponenten sind mit Hilfe der Glasabdichtung zusammengefügt. Das verwendete Glas dient sowohl der Abdichtung der Gasbereiche als auch der Verbindung der Komponenten, um die Strukturstabilität zu gewährleisten. Die Zelle ist in die Oberschale eingeschweißt.

Wie bereits erwähnt, müssen die Randbedingungen bekannt sein, um die strukturmechanische Randwertaufgabe zu lösen. Im betrachteten Fall handelt es sich um die thermischen Lasten, die infolge Fluid-Solid-Interaktion durch hohe Gastemperaturen hervorgerufen werden. Ihre Ermittlung bedarf einer fluiddynamischen Analyse der Strömung im Stack. Zu diesem Zweck wird zunächst auf Basis der Finite Volumen Methode (FVM) ein gekoppeltes fluiddynamisches Modell aufgestellt, das in Abbildung 3.3 dargestellt ist, wobei aufgrund der Struktursymmetrie das Modell aus der Hälfte des Gesamt-Stacks besteht.

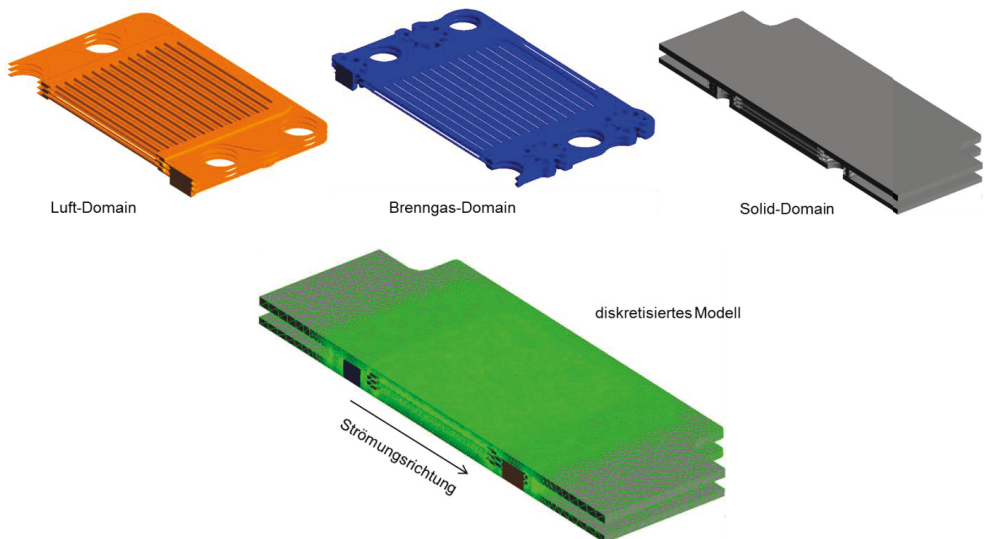


Abbildung 3.3: Fluiddynamisches diskretisiertes Modell

Im oberen Teil der Abbildung sind Fluidbereiche und der Festkörper einzeln dargestellt. Dagegen ist im unteren Teil der Abbildung das diskretisierte Gesamtmodell zu sehen, wie es für die Berechnung benötigt wird.

In den folgenden zwei Abschnitten wird das Modellverhalten getestet und validiert. Hierzu werden zunächst Simulationsberechnungen durchgeführt, um die Konvergenz der Berechnung mit dem aufgestellten Modell zu untersuchen. Anschließend wird das Modell für fluiddynamische Berechnungen ohne und mit der Kopplung der Energiegleichung eingesetzt. Die Berechnungsergebnisse werden auf Plausibilität überprüft und mit Resultaten verglichen, die experimentell validiert sind.

3.3 Überprüfung und Validierung des fluiddynamischen Modells

Für die Überprüfung des Modellverhaltens werden zunächst mit Hilfe des Modells fluiddynamische Analysen durchgeführt, die von der Energiegleichung entkoppelt sind. Diese Vorgehensweise hat den Vorteil, die Simulationsberechnung mit weniger Zeitaufwand aufgrund der vergleichsweise mäßigeren Berechnungsintensität durchzuführen. Danach erfolgt die Überprüfung des gekoppelten fluiddynamischen Modells. Als Beispiel der verwendeten Randbedingungen werden für die Volumenströme sowohl anoden- als auch kathodenseitig 5 NL/min/Ebene angenommen. Als Ergebnis zeigt Abbildung 3.4 den Verlauf der Strömungslinien im Brenngasbereich, wobei die Gleichmäßigkeit des Strömungsfeldes im Kanalbereich deutlich zu sehen ist.

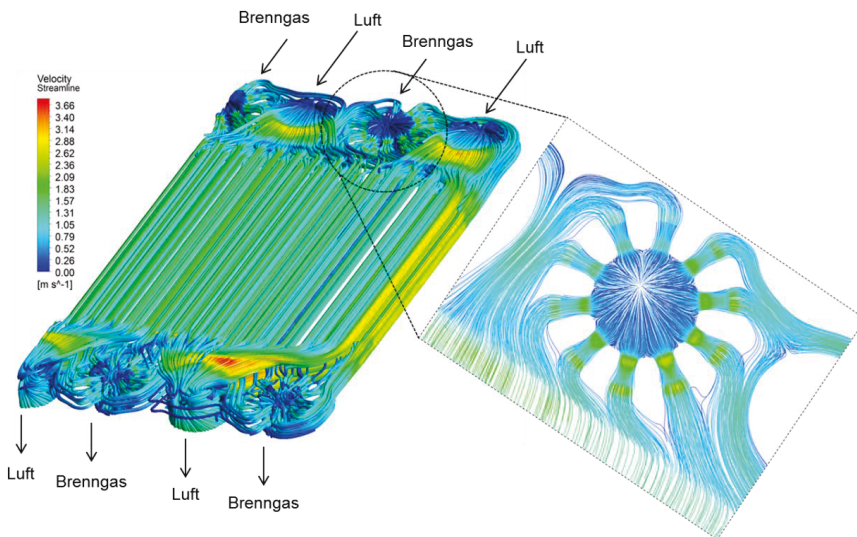


Abbildung 3.4: Strömungslinien im fluiddynamischen Modell

Zwecks der Modellvalidierung wurden fluiddynamische Simulationsberechnungen unter verschiedenen Randbedingungen durchgeführt. Die ermittelten Ergebnisse wurden mit vorhandenen Daten verglichen, die experimentell validiert sind [4]. Als Beispiel zeigt Abbildung 3.5 die Druckverteilung im Luftbereich des vorhandenen Vergleichsmodells sowie des neu auf-

gestellten Modells. Für die Simulationsberechnung wurde ein vergleichbarer Wert der Einstömungsgeschwindigkeit der Luft von 0.15 m/s angenommen.

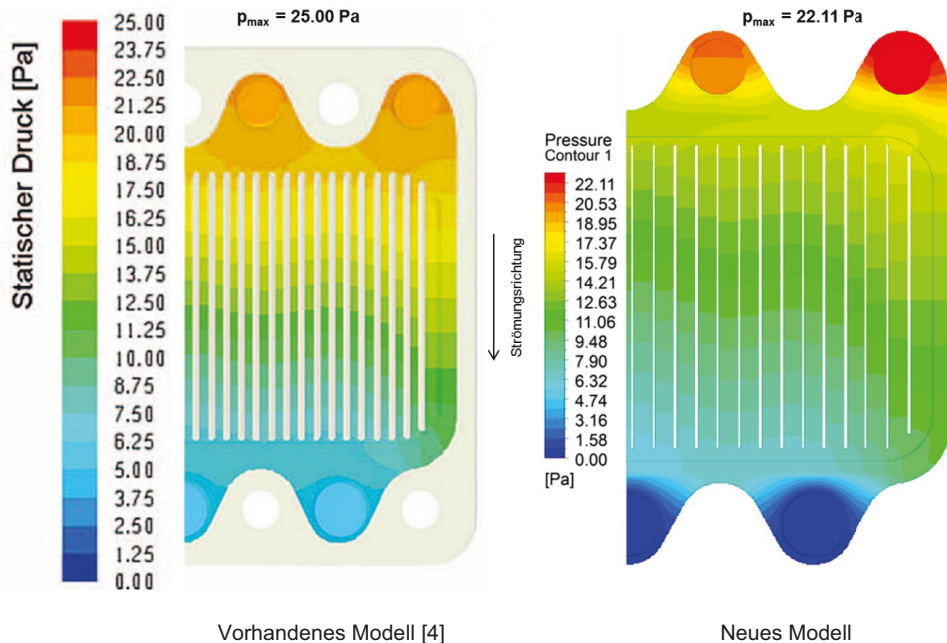


Abbildung 3.5: Modellvalidierung (Druckfeld)

Trotz der Unterschiede in den geometrischen Einzelheiten beider Modelle zeigen die Berechnungsergebnisse die Plausibilität des aufgestellten Modells anhand des erwarteten wellenartigen Verlaufs der Isobaren. Ferner sind die Druckverluste in beiden Modellen vergleichbar.

3.4 Überprüfung und Validierung des gekoppelten transienten Modellverhaltens

Im vorigen Abschnitt wurde das fluiddynamische Modellverhalten ohne Berücksichtigung der Energiegleichung betrachtet. Der Einfluss des Wärmeaustauschs zwischen den heißen strömenden Gasen und dem Festkörper des Stacks wird im nächsten Schritt berücksichtigt. Hierzu wird die gekoppelte transiente Aufheizphase simuliert, wobei sowohl anodenseitig als auch kathodenseitig folgende Randbedingungen angenommen werden:

- Prozess: transient und adiabat
- Aufheizmedium: Luft
- Volumenstrom: 5 NL/min/Ebene
- Aufheizkurven: linear mit einer Steigung von 7 °C/min (Abbildung 3.6)
- Anfangstemperatur: 50 °C

- Endtemperatur: 750 °C
- Aufheizzeit 6000 s

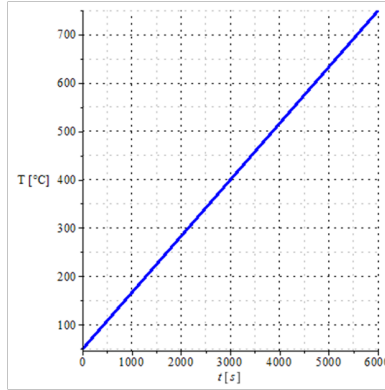


Abbildung 3.6: Lineare Aufheizkurve

Zur Überprüfung der Ergebnisse der numerischen fluiddynamischen Berechnung wird kontrolliert, ob die Energiegleichung erfüllt ist. Zu diesem Zweck wird der über die Zeit berechnete Wärmestrom der Gase mit der Änderung der inneren Energie des Festkörpers, die durch Wärmeaufnahme zustande kommt, verglichen. Die vom Gas abgegebene Wärmeleistung \dot{Q}_g lässt sich gemäß der Beziehung

$$\dot{Q}_g = \frac{dQ_g}{dt} = \sum_i \dot{m}_i * c_{pi} * (T_{g,in} - T_{g,aus})_i \quad (3.21)$$

ausdrücken, wobei über alle Gaskomponenten summiert wird. In Gleichung (3.21) stellen die Größen

- \dot{m}_i : Massenstrom der i -ten Gaskomponente
- c_{pi} : spezifische Wärmekapazität der i -ten Gaskomponente
- $T_{g,in}$: Einströmungstemperatur der i -ten Gaskomponente
- $T_{g,aus}$: Ausströmungstemperatur der i -ten Gaskomponente

dar. Da die Temperatur des Festkörpers sowohl eine Zeit- als auch eine Ortsfunktion ist, muss über den Festkörper eine volumen-gemittelte Temperatur T_s ermittelt werden. Dies erfolgt mit Hilfe der volumengemittelten Approximation

$$T_s(t) \approx \frac{\int_{V_s} T(t, x_1, x_2, x_3) dx_1 dx_2 dx_3}{V_s} = \frac{\int_{V_s} T(t, x_1, x_2, x_3) dV_s}{V_s} \quad (3.22)$$

wobei V_s das Volumen des Festkörpers bedeutet. Mit dem Mittelwert einer Festkörpertemperatur lässt sich die aufgenommene Wärmeleistung \dot{Q}_s näherungsweise durch die Gleichung

$$\dot{Q}_s = \frac{dQ_s}{dt} = \rho_s * V_s * c_s * \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (3.23)$$

angeben. Dabei bezeichnen die Größen

ρ_s : Dichte des Festkörpers

c_s : spezifische Wärmekapazität des Festkörpers

T_s : gemittelte Festkörpertemperatur

Die Zeitverläufe der anodenseitigen und kathodenseitigen Temperaturen $T_{g,in}$, $T_{g,aus}$ sowie T_s sind in Abbildung 3.7 gezeigt und mit der linearen Aufheizkurve verglichen. In der Abbildung ist zu erkennen, dass die Ausströmtemperaturen der Gase nahe beieinanderliegen. Da die Temperaturen der Gase und des Festkörpers bei einem festgehaltenen Zeitpunkt in Strömungsrichtung abnehmen, entsteht in Festkörper in der Umgebung der Einströmung ein Bereich mit hohen Temperaturen. Dadurch ergibt sich gemäß Gleichung (3.22) eine volumengewichtete Festkörpertemperatur T_s , die höher als die Ausströmtemperaturen der Gase ist, wie in Abbildung 3.7 erkennbar ist.

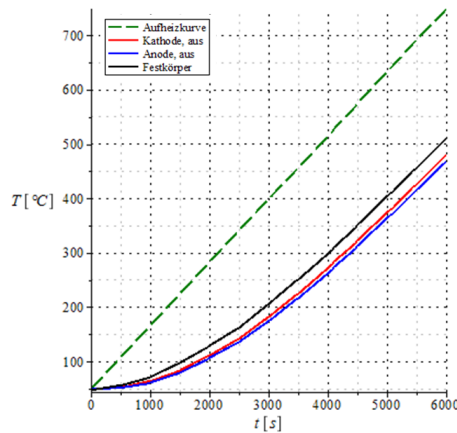


Abbildung 3.7: Zeitlicher Verlauf der Gas- und Festkörpertemperaturen

Die entsprechenden Zeitverläufe der Wärmeleistungen \dot{Q}_g und \dot{Q}_s sind in Abbildung 3.8 dargestellt. Wie die Abbildung deutlich zeigt, liegen die zeitlichen Verläufe der ausgetauschten Wärmemengen nahe beieinander, was daraufhin deutet, dass die Energiegleichung unter der Annahme eines adiabaten Prozesses erfüllt ist und somit die Plausibilität des verwendeten Modells nachgewiesen ist.

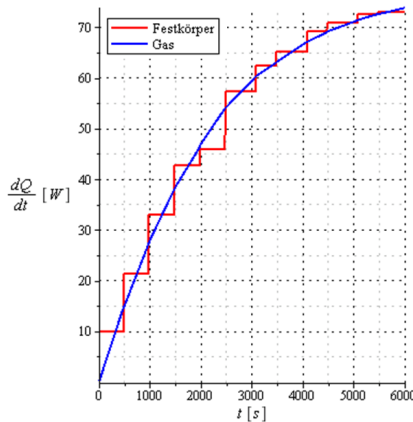


Abbildung 3.8: Zeitlicher Verlauf der ausgetauschten Wärmemengen

Der stufenartige Verlauf von \dot{Q}_s ergibt sich aus der multilineareren Interpolation der Temperatur-Zeit-Kurve des Festkörpers in Abbildung 3.7. Die Abweichung zwischen den Verläufen von \dot{Q}_g und \dot{Q}_s ist dadurch zu begründen, dass über dem Festkörper eine ortsabhängige Temperaturverteilung existiert und die in dieser Vergleichsberechnung verwendete Temperatur T_s lediglich eine Annäherung darstellt. Ferner ist die Auflösung über die Zeit mit einem Zeitschritt von 500 s ziemlich grob, da eine feinere Auflösung mit kleineren Zeitschritten einen höheren Rechenaufwand erfordert.

Für das weitere Vorgehen wird das Stack-Verhalten exemplarisch zum Zeitpunkt 5000 s nach dem Start der Aufheizung betrachtet. In Abbildung 3.9 ist das berechnete Temperaturprofil im Gasbereich mit den Strömungslinien dargestellt. Zu diesem Zeitpunkt liegt die Einströmungstemperatur der Gase bei 630 °C. Eine detaillierte Analyse der Aufheizphase erfolgt in Kapitel 6.

Erwartungsgemäß geben die heißen Gase ihre Wärme am Eintritt ab, sodass die Temperaturen in den Einströmungsbereichen höher sind als in den Ausströmungsregionen. Ferner treten sowohl Hotspots als auch höhere Temperaturgradienten in den Einströmungsgebieten auf.

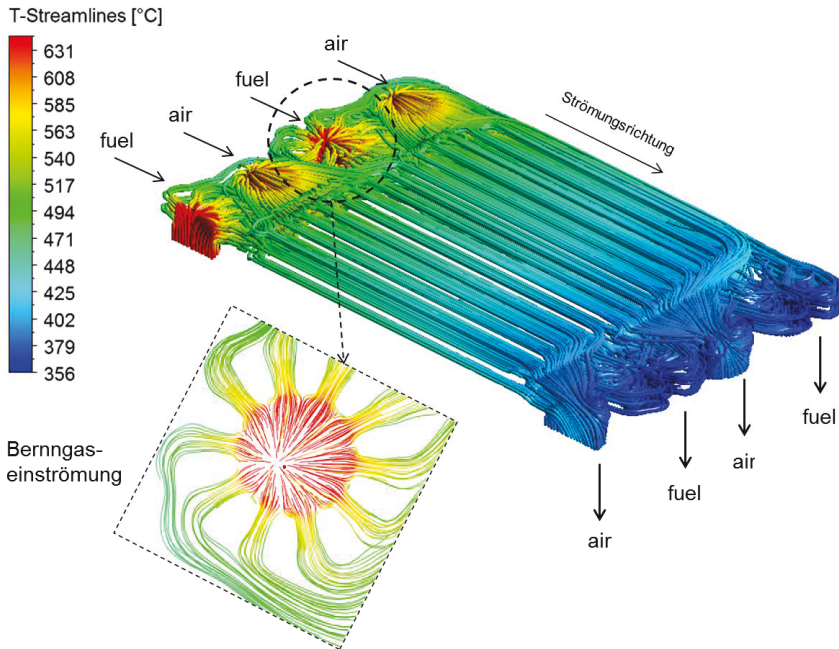


Abbildung 3.9: Strömungslinien im gekoppelten fluiddynamischen Modell

Dieses Verhalten wird bei der Untersuchung des fluiddynamischen Verhaltens ähnlicher Stacks beobachtet, wie die Abbildung 3.10 zeigt [74, 92, 93]. Das entsprechende Profil des Temperaturgradienten zum betrachteten Zeitpunkt ist in Abbildung 3.11 dargestellt. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, treten die maximalen Werte des Temperaturgradienten im Einströmungsbereich der heißen Gase auf. Beträgsmäßig wird ein Höchstwert von $9,31\text{ °C/mm}$ erreicht. Im Gegensatz hierzu ist die Temperatur in den Zonen, die vom Einströmungsbereich entfernt sind, homogener verteilt. Folglich ist der Betrag des Temperaturgradienten in diesen Zonen niedrig.

Die gekoppelte fluiddynamische Simulationsberechnung zeigt, dass das aufgestellte Modell für die Untersuchung des zeitabhängigen thermischen Stack-Verhaltens gut geeignet ist. Das fluiddynamische Modell kann eingesetzt werden, um die räumliche Temperaturverteilung im Stack in den verschiedenen, sowohl stationären als auch transienten Prozessphasen, zu bestimmen. Die ermittelten Temperaturprofile dienen als thermische Last und definieren damit einen Teil der erforderlichen Randbedingungen, die für die Durchführung der thermomechanischen Analyse auf Basis der FEM benötigt werden. Die Ergebnisse der fluiddynamischen Berechnungen deuten darauf hin, dass der Einströmungsbereich der heißen Gase eine gefährdete Zone darstellt, wo aufgrund großer Temperaturgradienten hohe Spannungen zu erwarten sind. Dies ist noch mit Hilfe der thermomechanischen Analyse genauer zu untersuchen. Auf das strukturelle Verhalten des Stacks unter thermischer und mechanischer Last wird im nächsten Kapitel eingegangen. Des Weiteren verfügt das aufgestellte fluiddynamische Modell über das Potenzial, für die Optimierungsanalyse eingesetzt zu werden. Ziel einer solchen Analyse ist die Reduzierung der Temperaturgradienten, um eine gleichmäßigere Temperaturverteilung im Stack zu erreichen. Zu diesem Zweck können die Auswirkungen der Variation der fluiddynamischen Randbedingungen auf das verursachte

Temperaturfeld untersucht werden. Diese Thematik wird im Kapitel 7 in Einzelheiten behandelt.

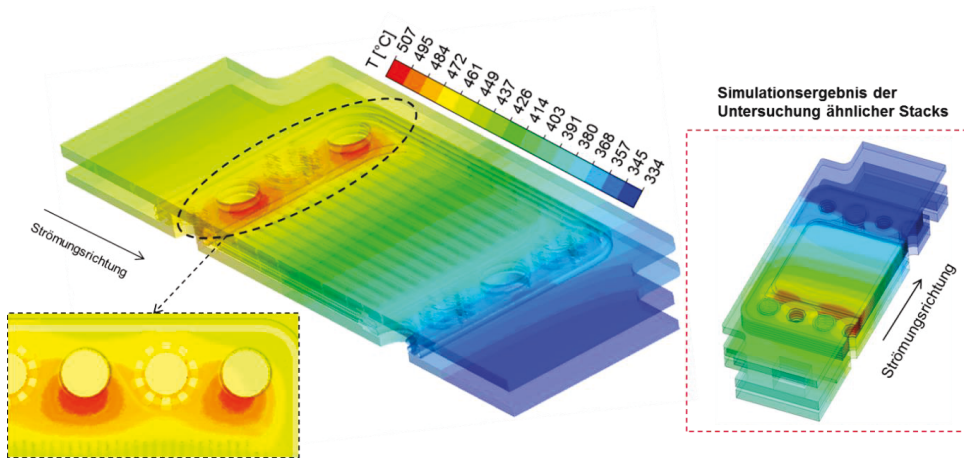


Abbildung 3.10: Temperaturverteilung im Stack

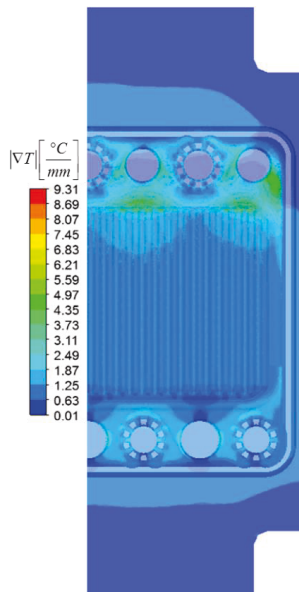


Abbildung 3.11: Temperaturgradient im Stack

4 Thermomechanische Analyse

4.1 Einführung

Ziel der thermomechanischen Analyse ist die Vorhersage des strukturellen Verhaltens unter thermischen und mechanischen Lastbedingungen. Zu diesem Zweck wird die im vorigen Kapitel mit Hilfe der fluiddynamischen Analyse ermittelte Temperaturverteilung auf das strukturelle FE-Modell als Last übertragen. Die thermomechanische Untersuchung liefert Auskunft über die Verformung und die Spannungsverteilung im Stack. Daraus lässt sich ablesen, wo die maximalen Spannungen auftreten und somit welche Stellen durch Bruch oder infolge unzulässiger Deformationen gefährdet sind. Dadurch können die zur Gewährleistung der Funktionalität des Stacks notwendige Tragfähigkeit und Gebrauchstauglichkeit seiner Komponenten geprüft werden. Des Weiteren lassen sich durch die Variation der Werkstoffe, der Geometrie und der Randbedingungen Maßnahmen ergreifen, um die hervorgerufenen Spannungen zu reduzieren.

Zur Erläuterung der thermischen Deformationen betrachtet man ein infinitesimal kleines, würfelförmiges Element mit Seiten parallel zu den Ebenen eines Kartesischen Koordinatensystems. Unter der Wirkung einer Temperaturerhöhung relativ zu einer spannungsfreien Referenztemperatur erfährt ein solches Element Ausdehnungen in alle Raumrichtungen. Ein Körper, der als Kontinuum angesehen wird, besteht aus einer unendlichen Anzahl dieser kleinen Elemente, die gleichgroß und zusammengehalten sind. Eine Temperaturerhöhung, die im Körper inhomogen verteilt ist, ruft in jedem infinitesimalen Element thermische Dehnungen hervor, die von dessen lokaler Temperatur abhängig ist. Damit die Elemente weiterhin zusammenpassen und ein Kontinuum bilden, werden Verzerrungen im Körper hervorgerufen, sodass jedes Element der Deformation benachbarter Elemente widersteht und zur Erfüllung der Kompatibilitätsbedingung die Stetigkeit des Verschiebungsfeldes im verformten Körper erhalten bleibt, was gleichbedeutend mit der Beanspruchung durch innere Spannungen ist. Durch eine Temperaturänderung relativ zur spannungsfreien Referenztemperatur entstehen in den Stack-Komponenten thermische Dehnungen. Aufgrund der dreidimensionalen Struktur werden die thermischen Deformationen durch den Tensor der thermischen Dehnungen ε_{ij}^{th} , gemäß der Beziehung

$$\varepsilon_{ij}^{th} = \alpha * \Delta T * \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (4.1)$$

beschrieben, mit

$$\Delta T = T - T_{ref} \quad (4.2)$$

und

$$\alpha = \frac{1}{T - T_{ref}} * \int_{T_{ref}}^T \alpha'(\vartheta) * d\vartheta \quad (4.3)$$

Dabei sind α' der tangentielle Wärmeausdehnungskoeffizient des Materials, T und T_{ref} jeweils die herrschende Temperatur und die spannungsfreie Referenztemperatur. Durch die Multiplikation mit dem Kronecker Symbol δ_{ij} kommt zum Ausdruck, dass der Tensor der thermischen

Dehnung keine außerdiaagonalen Elemente besitzt, da infolge der thermischen Deformation keine Winkelverzerrungen verursacht werden. Durch eine Behinderung der Körperverformung infolge von

- Strukturkonfiguration (Auflagerung),
- Temperaturgradienten,
- Strukturinhomogenität oder Anisotropie

werden im Kontinuum Spannungen hervorgerufen. Bei Inhomogenität der Struktur sind die physikalischen Materialeigenschaften ortsabhängig und bei Anisotropie richtungsabhängig. Ferner kann die Temperaturabhängigkeit der Materialparameter durch die Existenz einer ungleichmäßigen und folglich ortsabhängigen Temperaturverteilung zur Inhomogenität der Struktur führen. Zur Erklärung wird die in Abbildung 4.1 gezeigte Struktur mit eindimensionaler Deformation entlang der Stabachsen herangezogen. Sie besteht aus zwei parallelen verformbaren Stäben, einer starren Scheibe und einem linearen Federelement.

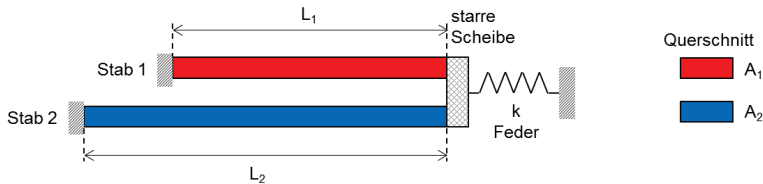


Abbildung 4.1: Stabstruktur mit nachgiebiger Auflagerung

Die einzelnen Elemente haben ihre jeweiligen geometrischen und physikalischen Parameter: $L_i, A_i, E_i, \alpha_i, i = 1, 2$,

welche jeweils die Längen, Querschnittsflächen, Elastizitätsmoduln und die Wärmeausdehnungskoeffizienten darstellen. Ferner ist die Feder durch die konstante Federrate k charakterisiert. Die Stäbe sind durch die Zunahme ihrer Temperaturen θ_1 und θ_2 relativ zu einer spannungsfreien Referenztemperatur beansprucht. Die Bedingungen für Gleichgewicht sowie Kompatibilität der Verformungen sind durch die Zusammenhänge

$$\sigma_1 * A_1 + \sigma_2 * A_2 = k * u \quad (4.4)$$

und

$$\left(\alpha_1 * \theta_1 + \frac{\sigma_1}{E_1} \right) * L_1 = \left(\alpha_2 * \theta_2 + \frac{\sigma_2}{E_2} \right) * L_2 = -u \quad (4.5)$$

gegeben. Dabei bezeichnen die Terme $\alpha_i * \theta_i$ die in den einzelnen Stäben hervorgerufenen freien thermischen Dehnungen, während die Terme σ_i / E_i die jeweiligen mechanischen Dehnungen darstellen, welche die Stetigkeit der Verschiebung bewirken. Die zwei Gleichungen (4.4) und (4.5) können nach den beiden Unbekannten σ_1 und σ_2 gelöst werden. Beispielsweise ergibt sich für σ_1 der Ausdruck

$$\sigma_1 * \left(1 + \frac{C_2}{C_1} + \frac{k}{C_1} \right) = -\frac{C_2}{A_1} (\alpha_1 * \theta_1 * L_1 - \alpha_2 * \theta_2 * L_2) - \frac{k * \alpha_1 * \theta_1 * L_1}{A_1}, \quad (4.6)$$

wobei die neuen Parameter C_1 und C_2 eingeführt sind. Diese stellen die Dehnsteifigkeiten der Stäbe dar und sind gemäß

$$C_i = \frac{A_i E_i}{L_i}, \quad i = 1, 2 \quad (4.7)$$

definiert. Gleichung (4.6) zeigt deutlich, wie die Stabspannung von den Steifigkeitsverhältnissen der Stäbe C_2/C_1 und der Auflagerung k/C_1 beeinflusst wird. Wie die Definition gemäß Gleichung (4.7) verdeutlicht, sind die Steifigkeiten sowohl von den mechanischen Materialeigenschaften als auch von der Geometrie der Struktur abhängig. Weiterhin ist die Spannungsabhängigkeit von den unterschiedlichen Temperaturen in der Struktur sowie von den verschiedenen thermischen Materialeigenschaften α_i und den Lasten θ_i erkennbar. Somit sind anhand dieses Beispiels die Auswirkungen der anfangs erwähnten Bedingungen der Auflagerung, Materialinhomogenität und Temperaturunterschiede bzw. Ungleichmäßigkeit der Temperaturverteilung veranschaulicht.

4.2 Aufstellung des 3-dimensionalen thermomechanischen Modells

Bei der Untersuchung des thermomechanischen Stack-Verhaltens wird der Stack insgesamt als inhomogene Struktur betrachtet, die aus verschiedenen Materialien mit unterschiedlichen mechanischen und thermischen Eigenschaften aufgebaut ist. Wie bereits in Kapitel 2 erläutert, werden die thermische und die strukturmekanische Aufgabe entkoppelt angesehen. Die Lösung der thermomechanischen Aufgabe auf Basis der Kontinuumsmechanik besteht darin, die räumliche Verteilung folgender Feldgrößen zu diskreten Zeitpunkten zu ermitteln:

- Das Verschiebungsfeld: $u_i(x_1, x_2, x_3)$
- Das Verzerrungsfeld: $\varepsilon_{ij}(x_1, x_2, x_3)$
- Das Spannungsfeld: $\sigma_{ij}(x_1, x_2, x_3)$

Darin sind aufgrund der Symmetrie der Spannungs- und Verzerrungstensoren 15 Unbekannte zu bestimmen (3 Komponenten des Verschiebungsvektors, 6 Komponenten des Verzerrungstensors und 6 Komponenten des Spannungstensors). Basierend auf der Kontinuumsmechanik stehen 3 Gruppen von Beziehungen zur Verfügung, die insgesamt 15 Feldgleichungen beinhalten.

Die erste Gruppe enthält die statischen Beziehungen gemäß

$$\sigma_{ji,j} = -b_i \Rightarrow \sigma_{ji,j} = 0_i \quad (4.8)$$

Sie beschreiben das Gleichgewicht des Kontinuums mit Hilfe der Relation zwischen der Divergenz des Spannungstensors $\sigma_{ji,j}$ und der Dichte der äußeren Volumenkräfte b_i , die an jedem Teilchen des Kontinuums wirken, wie beispielsweise die Schwerkraft, die hier jedoch

nicht berücksichtigt wird. Folglich verschwindet die Divergenz des Spannungstensors und die linke Seite der Gleichung (4.8) wird zum Nullvektor. Die statischen Gleichungen sind vom Material unabhängig.

Die zweite Gruppe umfasst die kinematischen Zusammenhänge in der Form

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (4.9)$$

Sie definieren die Komponenten des Verzerrungstensors durch den Gradienten des Verschiebungsvektors und sind ebenfalls vom Material des betrachteten Körpers unabhängig. Des Weiteren gilt der additive Zusammenhang zwischen dem Tensor der mechanischen ε_{ij}^m

Verzerrungen und dem Tensor der thermischen Dehnungen ε_{ij}^{th} gemäß

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^m + \varepsilon_{ij}^{th} \quad (4.10)$$

zur Ermittlung des Tensors der Gesamtverzerrung ε_{ij} . Die dritte Gruppe bilden die Materialmodelle, welche die allgemeine Form

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(T, \varepsilon_{ij}, \dot{\varepsilon}_{ij}) \quad (4.11)$$

haben. Diese Gleichungsgruppe beschreibt das Materialverhalten durch den Zusammenhang zwischen dem Spannungs- und dem Verzerrungstensor. Die Charakterisierung des Materialmodells erfolgt experimentell auf makroskopischer Ebene. Des Weiteren kommen zur Lösung der thermomechanischen Aufgabe die folgenden Randbedingungen hinzu:

- die mechanischen Auflagerkräfte, die eine Starrkörperbewegung des Stacks verhindern,
- die aufgebrachte Drucklast, die die Ebenheit sowie den Kontakt der Komponenten sicherstellt und
- die thermische Last, die durch die strömenden heißen Gase übertragen wird

Somit ist die Randwertaufgabe mathematisch bestimmbar. Das Materialmodell beinhaltet kombinierte Einflüsse der Thermoelastizität, Thermoplastizität und das Kriechen, wobei die Modellparameter temperaturabhängig sind. Eine wesentliche Annahme bei der Modellformulierung basiert auf der Theorie, dass sich die mechanische Verzerrung in Gleichung (4.10) aus der Addition der elastischen ε_{ij}^e , plastischen ε_{ij}^p und viskosen ε_{ij}^c Anteile ergibt. Folglich erhält Gleichung (4.10) die Form

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p + \varepsilon_{ij}^c + \varepsilon_{ij}^{th} \quad (4.12)$$

In der vorliegenden Arbeit werden Materialmodelle eingesetzt, die das elastische sowie plastische zeitunabhängige und viskoelastische zeitabhängige Materialverhalten berücksichtigen. Im Folgenden werden zur Vereinfachung die Grundgleichungen der Thermoelastizität vorgestellt, wobei die Erweiterung auf Probleme mit plastischen Deformationen in der Literatur zu

finden ist [80, 81, 98]. Dementsprechend reduziert sich die Gesamtverzerrung in Gleichung (4.12) auf die Form

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{th} . \quad (4.13)$$

Folglich besteht die Gesamtverzerrung an einem materiellen Punkt des Körpers aus den thermischen und mechanischen Anteilen des Verzerrungstensors. Die thermischen Anteile kommen infolge einer Temperaturänderung relativ zur spannungsfreien Referenztemperatur zustande und enthalten lediglich Normaldehnungen, jedoch keine Winkelverzerrungen. Hin- gegen werden die elastischen Anteile durch ungleichmäßige Temperaturverteilung und gegebenenfalls unter mechanischer Last hervorgerufen. Sie gewährleisten, dass durch die Ver- formung des Körpers die Kompatibilitätsbedingung nicht verletzt wird, wie im Abschnitt 4.1 erläutert wurde.

Die aufgestellten Gleichungen, welche die thermomechanische Aufgabe beschreiben, sind nichtlinear und gekoppelt, weshalb auch eine analytische Lösung nicht verfolgt wird. Statt- dessen kommt eine numerische Lösung auf Basis der FEM in Betracht. Hierzu wird das Kon- tinuum zunächst in endlich-große Elemente diskretisiert, die an den Elementknoten verbun- den sind. Mit Hilfe der Variationsrechnung werden die partiellen Differentialgleichungssyste- me der Feldgrößen in algebraische Gleichungen transformiert, die das Verhalten des diskre- tisierten Kontinuums beschreiben und deren Lösung die gesuchten Feldgrößen an den Ele- mentknoten liefert. Die ermittelten Knotenlösungen werden als Freiheitsgrade bezeichnet. Anschließend werden die Feldfunktionen mit Hilfe von Interpolationsfunktionen und den Frei- heitsgraden über die einzelnen Elemente interpoliert. Ausgehend von der statischen Gleich- gewichtsbedingung laut Gleichung (4.8) ergibt sich nach Multiplikation mit einer virtuellen Verschiebung δu_i und anschließender Integration über das Volumen des betrachteten drei- dimensionalen Bereichs V die Beziehung

$$\int_V \sigma_{ji,j} \delta u_i dV = 0 \quad (4.14)$$

Unter Berücksichtigung der Produktregel der Differentialrechnung laut der Beziehung

$$(\sigma_{ji} \delta u_i)_{,j} = \sigma_{ji,j} \delta u_i + \sigma_{ji} \delta u_{i,j} \quad (4.15)$$

erhält Gleichung (4.14) die Form

$$\int_V (\sigma_{ji} \delta u_i)_{,j} dV = \int_V \sigma_{ji} \delta u_{i,j} dV , \quad (4.16)$$

die der partiellen Integration entspricht. Mit Hilfe der Symmetrie des Spannungstensors lässt sich der Integrand auf der rechten Seite der Gleichung (4.16) gemäß

$$\sigma_{ji} \delta u_{i,j} = \frac{1}{2} (\sigma_{ji} + \sigma_{ij}) \delta u_{i,j} = \frac{1}{2} (\sigma_{ji} \delta u_{i,j} + \sigma_{ij} \delta u_{j,i}) \quad (4.17)$$

umformen. Aus Gleichung (4.17) ergibt sich die Beziehung

$$\sigma_{ji} \delta u_{i,j} = \sigma_{ji} \frac{1}{2} (\delta u_{i,j} + \delta u_{j,i}), \quad (4.18)$$

die aufgrund der Definition (4.9) die Form

$$\sigma_{ji} \delta u_{i,j} = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}, \quad (4.19)$$

annimmt. Des Weiteren stellt der Integrand auf der linken Seite der Gleichung (4.16) die Divergenz eines Tensors erster Stufe dar. Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes kann das Integral auf die Form

$$\int_V (\sigma_{ji} \delta u_{i,j})_{,j} dV = \int_A \sigma_{ji} n_j \delta u_i dA \quad (4.20)$$

gebracht werden, in der A die Oberfläche des betrachteten Volumens darstellt. Auf der rechten Seite der Gleichung (4.20) erkennt man, dass der Integrand eine Oberflächenkraft t_i enthält und folglich das Oberflächenintegral gemäß

$$\int_A \sigma_{ji} n_j \delta u_i dA = \int_A t_i \delta u_i dA \quad (4.21)$$

umgeformt werden kann. Somit erhält Gleichung (4.20) die Form

$$\int_V (\sigma_{ji} \delta u_{i,j})_{,j} dV = \int_A t_i \delta u_i dA \quad (4.22)$$

Einsetzen der Gleichungen (4.19) und (4.22) in Gleichung (4.16) liefert den Zusammenhang

$$\int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV = \int_A t_i \delta u_i dA \quad (4.23)$$

In Gleichung (4.23) lassen sich die linke und die rechte Seite jeweils als die inneren und äußeren virtuellen Arbeiten identifizieren, die bei einer virtuellen mit der Auflagerung des Körpers verträglichen Verschiebung geleistet werden. Folglich ist Gleichung (4.23) ein Ausdruck für das Prinzip der virtuellen Arbeit der Mechanik, das in der Literatur auch als schwache Form der Gleichgewichtsbedingung bezeichnet wird. Der Spannungstensor ist mit dem elastischen Verzerrungstensor durch das Materialmodell gemäß

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e \quad (4.24)$$

verknüpft, wobei

$$E_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (4.25)$$

den isotropen Elastizitätstensor darstellt. Die auftretenden Materialparameter λ und μ bezeichnen die Laméschen Konstanten und sind mit dem Elastizitätsmodul E und der Querkontraktionszahl ν gemäß den Beziehungen

$$\lambda = \frac{E \nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (4.26)$$

und

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (4.27)$$

verknüpft.

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (4.1), (4.13) und (4.24) erhält das Materialmodell eines thermoelastischen Werkstoffes die Form

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha \Delta T \delta_{kl}) \quad (4.28)$$

Das Materialmodell in Gleichung (4.28) berücksichtigt die thermischen Effekte im Kontinuum und zeigt, dass dadurch der Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen eine inhomogene lineare Beziehung ist. Der zusätzliche Term der nullten Ordnung wird infolge der thermischen Effekte eingeführt und bewirkt, dass Spannungen auftreten können, wenn keine Verzerrungen existieren oder auch Dehnungen verursacht werden, obwohl keine Spannungen hervorgerufen sind. Einsetzen von Gleichung (4.28) in Gleichung (4.23) liefert nach Umformen den Ausdruck

$$\int_V (E_{ijkl} \varepsilon_{kl}) \delta \varepsilon_{ij} dV = \int_A t_i \delta u_i dA + \int_V (E_{ijkl} \alpha \Delta T \delta_{kl}) \delta \varepsilon_{ij} dV \quad (4.29)$$

In der letzten Gleichung stellt der zweite Term auf der rechten Seite die thermischen Spannungen dar. Der Vergleich mit der linken Seite zeigt, dass dieser Term die Form der virtuellen Arbeit einer äußeren Volumenkraft besitzt, die an jedem Teilchen des Kontinuums im betrachteten materiellen Volumen wirkt. Dies wird durch das Volumenintegral angedeutet. Im Abschnitt 5.3 wird dieser Sachverhalt veranschaulicht, wenn die Auswirkungen des Temperaturgradienten auf die Spannungen im Stack untersucht werden.

Unter Berücksichtigung der kinematischen Beziehungen gemäß der Gleichungsgruppe (4.9) erhält Gleichung (4.29) die Form

$$\int_V (E_{ijkl} u_{k,l}) \delta u_{i,j} dV = \int_A t_i \delta u_i dA + \int_V (E_{ijkl} \alpha \Delta T \delta_{kl}) \delta u_{i,j} dV \quad (4.30)$$

Der erste Schritt in der FE-Formulierung besteht darin, ein mathematisches Modell für das diskretisierte System aufzustellen, das äquivalent zum realen kontinuierlichen System V ist. Zu diesem Zweck wird das Verschiebungsfeld innerhalb eines finiten Elementes V_e durch Ansatzfunktionen, die auch Formfunktionen genannt werden, repräsentiert. Die angenommene Verschiebungsverteilung wird so gewählt, dass mit abnehmender Größe der Elemente die Lösung des diskreten Systems gegen die exakten Werte des kontinuierlichen Systems konvergiert. Ferner ist ein diskretes Element an seinen Knoten mit den benachbarten Elementen verbunden. Die Verteilung einer physikalischen Feldgröße innerhalb des Elementes wird mit Hilfe der Werte dieser Größen an den Elementknoten formuliert. Die Werte der Feldfunktionen an den Modellknoten werden als Knotenfreiheitsgrade bezeichnet. Beispielsweise kann das Verschiebungsfeld innerhalb jedes Elements mit Hilfe einer Kombination aus den Verschiebungen der Elementknoten und den Interpolationsfunktionen gemäß der Vorschrift

$$u_i(x_1, x_2, x_3) = u_i^a N^a(x_1, x_2, x_3) \quad (4.31)$$

beschrieben werden. In Gleichung (4.31) stellt die linke Seite die ortsabhängige i -te Komponente des Verschiebungsvektors dar. u_i^a und $N^a(x_1, x_2, x_3)$ sind jeweils die i -te Komponente des Verschiebungsvektors und die Formfunktion am Knoten a . Dabei gilt die Summationsvereinbarung über alle Knoten des Elementes durch das Superskript a . Dementsprechend lassen sich auch die partiellen Ableitungen mit Hilfe der Beziehung

$$u_{i,k}(x_1, x_2, x_3) = u_i^a N_{,k}^a(x_1, x_2, x_3) \quad (4.32)$$

bestimmen. Einsetzen der Gleichungen (4.31) und (4.32) in Gleichung (4.30) liefert den Ausdruck

$$\int_{V_e} (E_{ijkl} u_k^b N_{,l}^b) N_{,j}^a \delta u_i^a dV_e = \int_{A_e} t_i N^a \delta u_i^a dA_e + \int_{V_e} (E_{ijkl} \alpha \Delta T \delta_{kl}) N_{,j}^a \delta u_i^a dV_e \quad (4.33)$$

Nach Zusammenfassen ergibt sich für ein finites Element mit dem Volumen V_e und der Oberfläche A_e die Beziehung

$$\left[\int_{V_e} E_{ijkl} N_{,l}^b N_{,j}^a dV_e \right] u_k^b \delta u_i^a = \left[\int_{A_e} t_i N^a dA_e \right] \delta u_i^a + \left[\int_{V_e} E_{ijkl} \alpha \Delta T \delta_{kl} N_{,j}^a dV_e \right] \delta u_i^a \quad (4.34)$$

Mit Hilfe der Definitionen

$$\begin{aligned} k_{ikba} &= \int_{V_e} E_{ijkl} N_{,l}^b N_{,j}^a dV_e \\ f_{ia} &= \int_{A_e} t_i N^a dA_e \\ h_{ia} &= \int_{V_e} E_{ijkl} \alpha \Delta T \delta_{kl} N_{,j}^a dV_e \end{aligned} \quad (4.35)$$

reduziert sich Gleichung (4.34) auf die kompakte Form

$$(k_{ikba} u_k^b - f_i^a - h_i^a) \delta u_i^a = 0 \quad (4.36)$$

Da die letzte Beziehung für jede beliebige virtuelle Verschiebung δu_i^a gelten muss, erhält der Steifigkeitsausdruck für ein finites Element die Form

$$k_{ikba} u_k^b - f_i^a - h_i^a = 0 \quad (4.37)$$

oder äquivalenterweise

$$k_{ikba} u_k^b = f_i^a + h_i^a \quad (4.38)$$

Die Steifigkeitsmatrix k_{ikba} ist abhängig von den mechanischen Eigenschaften der Struktur und ihrer Geometrie sowie von den Formfunktionen und den Knotenpositionen. Ähnlich sind die Vektoren der Knotenlasten f_i^a und h_i^a Funktionen der bekannten Randbedingungen und des Interpolationsschemas sowie der Knotenkoordinaten. Daher werden die drei Größen in der letzten Gleichung als bekannt angenommen. Der globale Steifigkeitsausdruck der gan-

zen Struktur ergibt sich durch Zusammenfügen der charakteristischen Größen der einzelnen Elemente gemäß den Vorschriften

$$\begin{aligned} K_{ikba} &= \sum_e {}^e k_{ikba} \\ F_i^a &= \sum_e {}^e f_i^a \\ H_i^a &= \sum_e {}^e h_i^a \end{aligned} \tag{4.39}$$

Dies führt zur globalen Beziehung

$$K_{ikba} U_k^b = F_i^a + H_i^a, \tag{4.40}$$

in der U_k^b den Vektor der Knotenverschiebungen aller Elemente der Struktur bezeichnet. Gleichung (4.40) stellt ein System linearer algebraischer Gleichungen dar, dessen Lösung der Vektor der unbekannten Knotenverschiebungen ist. Einsetzen der Lösung in die Formfunktionen führt zu einer vollständigen Beschreibung der Approximation des Verschiebungsfeldes. Basierend auf einem bekannten Verschiebungsfeld lässt sich die Verteilung der Dehnung durch Einsetzen des Verschiebungsgradienten in die kinematischen Beziehungen gemäß Gleichung (4.9) bestimmen. Mit den bekannten Dehnungen können anschließend die Spannungen mit Hilfe des Materialgesetzes (4.28) ermittelt werden. Aus den Steifigkeitsbeziehungen geht hervor, dass die Temperaturabhängigkeit der Dehnung durch h_{ia} von erster Ordnung ist, da h_{ia} proportional zu einem Integral mit der Temperatur über das ganze Element ist. Dagegen zeigt das Materialgesetz gemäß Gleichung (4.28), dass die Spannung sowohl infolge h_{ia} als auch durch die lokale Temperatur beeinflusst wird. Daraus ist zu folgern, dass sich numerische Fehler bei der Ermittlung des Temperaturgradienten auf die Spannungen stärker auswirken als auf die entsprechenden Dehnungen. Aus diesem Grund können genauere Werte der Spannungen ermittelt werden, indem die Temperaturen mit Hilfe eines feineren Rechennetzes berechnet werden und anschließend mit Dehnungen aus einem gröberen Rechennetz gekoppelt werden. Aus diesem Grund wird diese Kombination beider Vernetzungen verfolgt, um schließlich den Rechenaufwand zu reduzieren. Zur Lösung der vorliegenden Aufgabe wird das Software-Paket ANSYS eingesetzt. Das zu diesem Zweck benötigte FE-Modell ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Das Modell zeigt den gesamten Brennstoffzellen-Stack sowie die Teilkomponenten Ober- und Unterschalen mit dem in Einzelheiten erzeugten Rechennetz der Kanalbereiche. Die detaillierte Modellierung wird benötigt, um das strukturmechanische Verhalten des realen Bauteils zu berücksichtigen.

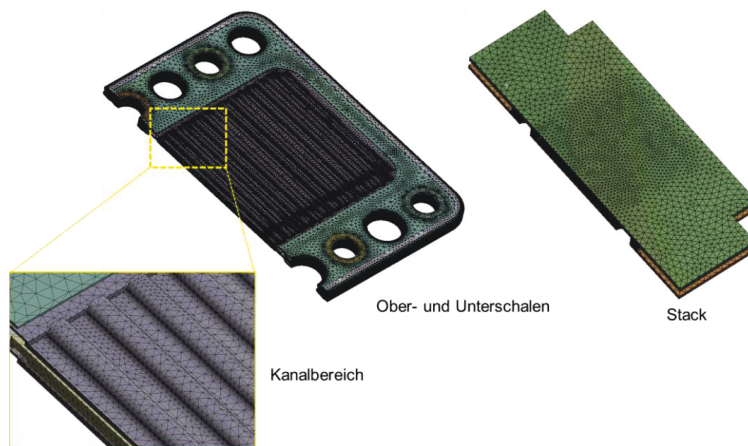


Abbildung 4.2: FE-Modell des Stacks

4.3 Überprüfung des thermomechanischen Modells

4.3.1 Definition der Randbedingungen

Zur Analyse des thermomechanischen Stack-Verhaltens wird das mit Hilfe des fluiddynamischen Modells ermittelte Temperaturfeld $T(x_1, x_2, x_3)$ auf Basis der sogenannten „Shape-Function“-Interpolationstechnik [99] auf das FE-Rechennetz übertragen. Betrachtet wird hier beispielhaft die Temperaturverteilung während der Aufheizphase 5000 s nach dem Start. Der fluiddynamische Prozess wurde unter den in Abschnitt 3.4 gegebenen Randbedingungen durchgeführt. In der FEA stellen die applizierten thermischen Lasten Volumenkräfte dar, da sie an jedem Punkt des Kontinuums angreifen. Abbildung 4.3 zeigt die Temperaturverteilung im originalen fluiddynamischen Modell sowie die interpolierte Verteilung auf dem FE-Modell, wobei eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den beiden Temperaturfeldern deutlich zu sehen ist.

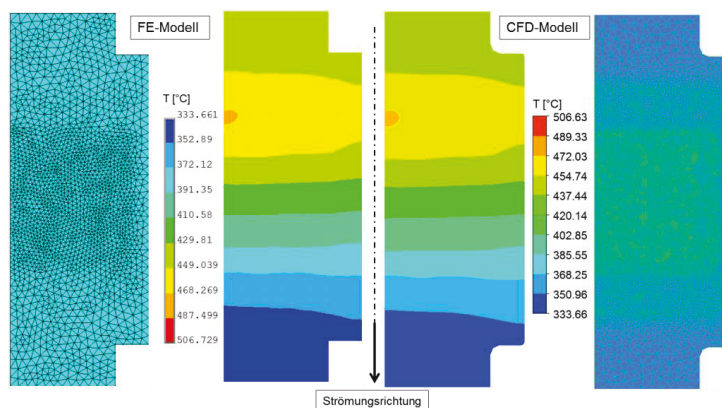


Abbildung 4.3: Übertragung der Temperaturverteilung auf das FE-Stack-Modell

Weiterhin sind in Abbildung 4.4 die Temperaturprofile in den Stack-Komponenten: Oberschale, Unterschale, Zelle und Glasfugung dargestellt. Zusatzlich zur inhomogenen thermischen Last wird der Stack durch eine Gewichtslast von 50 kg beansprucht, die auf der Oberplatte wirkt und zur Reduktion der Biegedeformation der dunnwandigen Stack-Komponenten dient. Damit wird der erforderliche Kontakt zwischen den Bauelementen wahrend des Betriebs sichergestellt.

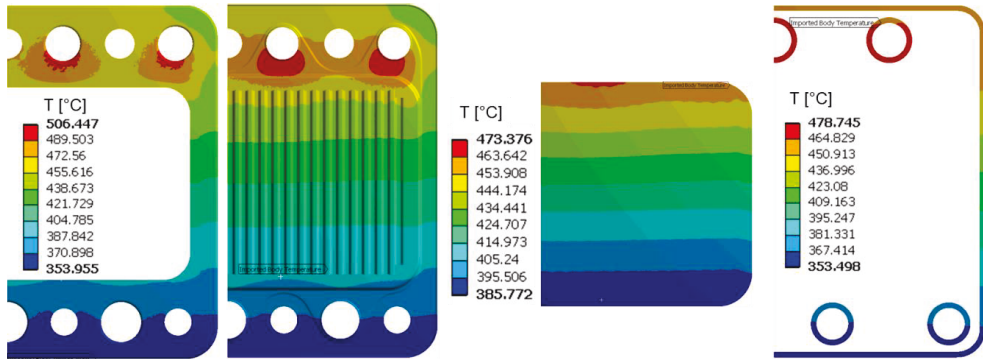


Abbildung 4.4: Ubertragung der Temperaturverteilung auf die Stack-Komponenten

Die Randbedingungen der FE-Berechnung sind in Abbildung 4.5 dargestellt und durch die folgenden Gleichungen beschrieben:

An jedem Punkt (x_1, x_2, x_3) des Stacks wirkt die Temperatur

$$T = T(x_1, x_2, x_3) \quad (4.41)$$

Auf der oberen Seite der Oberplatte greift die mechanische Last F_i mit

$$\begin{aligned} F_1 &= 0 \\ F_2 &= 0 \\ F_3 &= -500 \text{ N} \end{aligned} \quad (4.42)$$

An jedem Punkt $(x_1, x_2, 0)$ der unteren Seite der Unterplatte gilt die Kontaktbedingung mit der starren Unterlage gema

$$u_3(x_1, x_2, 0) = 0 \quad (4.43)$$

An jedem Punkt $(0, x_2, x_3)$ der Symmetrieebene gilt der Zusammenhang

$$u_1(0, x_2, x_3) = 0 \quad (4.44)$$

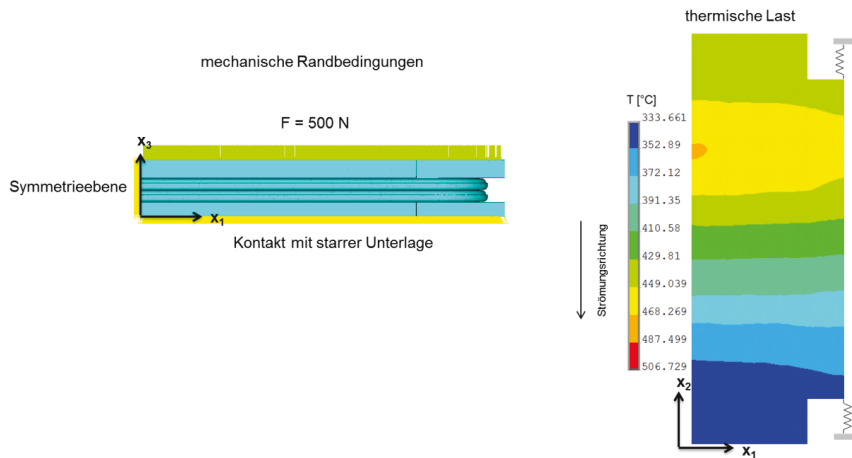


Abbildung 4.5: Randbedingungen der thermo-mechanischen Berechnung

Um eine Starrkörperbewegung des Stacks in x_2 -Richtung zu verhindern, werden an Eck-Knoten weiche Federelemente angebracht, deren Steifigkeit im Vergleich zur Struktursteifigkeit sehr klein ist. Folglich wird das Deformationsverhalten des Stacks hauptsächlich durch die Steifigkeit seiner Komponenten bestimmt, da die kleinen Federsteifigkeiten geringfügigen Einfluss haben.

4.3.2 Materialmodelle

Die für die Simulationsberechnung erforderlichen Materialmodelle der eingesetzten Werkstoffe basieren auf dem realen Werkstoffverhalten. Die Parameter der verwendeten Werkstoffmodelle stammen aus Experimenten, die am FZJ durchgeführt wurden, oder aus Datenblättern des entsprechenden Herstellers. In Tabelle 4.1 ist die Beschreibung des Materialverhaltens der einzelnen Komponenten zusammengefasst.

Tabelle 4.1: Materialverhalten der Stack-Komponenten

Werkstoff	Materialverhalten
Untere Platte	ITM, elastisch-plastisch-viskos
Obere Platte	ITM, elastisch-plastisch-viskos
Oberschale	ITM, elastisch-plastisch-viskos
Unterschale	ITM, elastisch-plastisch-viskos
Zelle	ITM (porös), elastisch-plastisch-viskos
Ringrahmen	ITM, elastisch-plastisch-viskos
Abdichtung	Glaskeramik G48, elastisch

Weiterhin wird bei der Simulationsberechnung die Temperaturabhängigkeit der verwendeten mechanischen und thermischen Materialparameter berücksichtigt. In Abbildung 4.6 sind die Elastizitätsmoduln des ITM-Stahls [100] und des Glases als Funktionen der Temperatur dargestellt. Beide Kurven haben ein monoton fallendes Verhalten mit steigender Temperatur, wobei über den betrachteten Temperaturbereich das Elastizitätsmodul des Stahls schneller abnimmt als der vom Glas. Dieser Vergleich wird in der normierten Darstellung im rechten Teil der Abbildung deutlicher, wo es ersichtlich ist, dass bei einer Aufheizung von Raumtemperatur auf 800 °C das Elastizitätsmodul des Stahls um ungefähr 40% abnimmt, während die Abnahme beim Glas lediglich 10% beträgt.

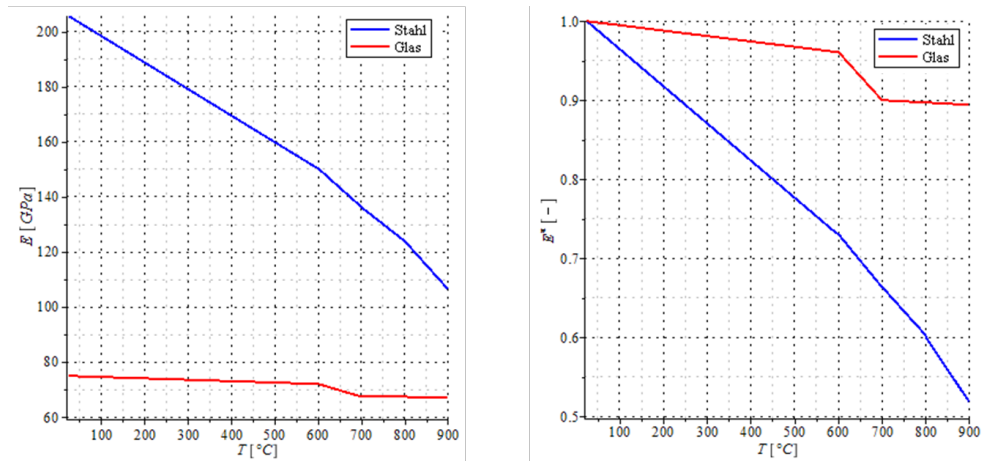


Abbildung 4.6: Temperaturabhängigkeit der E-Moduli (links) und der relativen E-Moduli (rechts)

Wie in der Tabelle 4.1 angegeben, wird für den ITM-Stahl ein elastisch-plastisches Materialmodell eingesetzt. Für die Simulationsberechnung wird ein solches Materialverhalten durch ein bilineares mathematisches Modell beschrieben, welches die Materialverfestigung nach dem Erreichen der Fließgrenze berücksichtigt. In Abbildung 4.7 sind die Spannungs-Dehnungs-Kurven des ITM-Stahls bei verschiedenen Temperaturen dargestellt.

Weitere Materialparameter, die das thermomechanische Festkörperverhalten beeinflussen, sind die Wärmeausdehnungskoeffizienten der Stack-Komponenten. Ihre Auswirkung auf die hervorgerufenen Spannungen ist von großer Bedeutung, weshalb auch ihre Anpassung erforderlich ist.

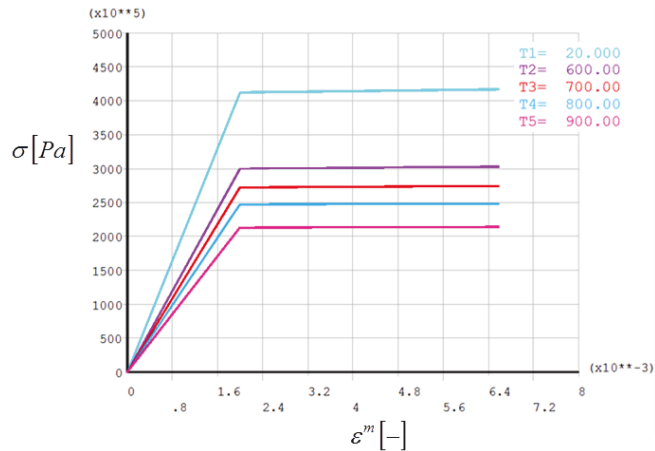


Abbildung 4.7: Spannungs-Dehnungs-Verhalten des ITM-Stahls

Aufeinander abgestimmte Wärmeausdehnungskoeffizienten der benachbarten Komponenten sorgen für verträgliche Verformungen im Übergangsbereich zwischen den verschiedenen Werkstoffen und bewirken somit eine Verringerung der thermischen Spannungen. Sowohl für den Stahl als auch für das Glas ist dieser Materialparameter temperaturabhängig, wie in Abbildung 4.8 dargestellt. Für beide Materialkomponenten nimmt der Wärmeausdehnungskoeffizient bei hohen Temperaturen mit steigender Temperatur zu.

Für die glaskeramische Komponente wird ein temperaturabhängiges elastisches Materialmodell verwendet, da die experimentellen Untersuchungen zeigen, dass das eingesetzte Material der Glasfügung unter hohen Temperaturen bis zu 80% rekristallisiert [101], weshalb keine Kriechdehnung in der Glasfügung auftritt. Aus diesem Grund ist für die Beschreibung des mechanischen Glasverhaltens kein Kriechmodell erforderlich. Für die Stahlkomponenten werden temperaturabhängige elastisch-plastische Materialmodelle eingesetzt, wobei unter hohen Temperaturen ein zusätzliches Kriechmodell in der Berechnung implementiert wird. Auf die Einzelheiten der Modellaufstellung und die experimentelle Parameterermittlung wird im nächsten Abschnitt eingegangen. Die experimentellen Daten wurden aus Kriechversuchen gewonnen, die in [100] ausführlich beschrieben sind.

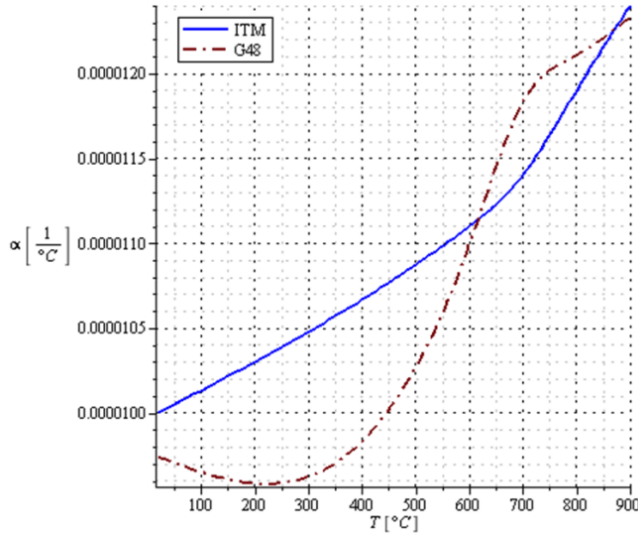


Abbildung 4.8: Temperaturabhängigkeit der Wärmeausdehnungskoeffizienten

4.3.3 Kriechverhalten des ITM-Stahls

Die Untersuchung des Kriechverhaltens von Strukturkomponenten ist in technischen Anwendungen erforderlich, in denen genaue Dimensionen der Struktur über einen längeren Zeitraum aufrechterhalten werden müssen. Hierbei stellt die Kriechdehnung ein Prüffaktor für das Design von Bauteilen, die unter hohen Betriebstemperaturen eingesetzt werden, wie die SOFC. Insbesondere für APU-Anwendungen müssen die dünnwandigen Stack-Komponenten ausreichende Kriechfestigkeit aufweisen, um die Einsatzanforderungen zu erfüllen.

Durch die Einwirkung hoher Temperaturen mit

$$T > 0,4 * T_M, \quad (4.45)$$

wobei T_M die Schmelztemperatur des betrachteten Materials ist, zeigen metallische Werkstoffe ein zeitabhängiges Materialverhalten. Dies bedeutet, dass unter gleichbleibender Last die Dehnung mit der Zeit zunimmt, was als Kriechen bezeichnet wird. Dagegen nimmt die Spannung unter konstanter Dehnung ab, was als Relaxation bezeichnet wird. Ein typischer Verlauf der Dehnung über die Zeit bei konstanter Spannung und Temperatur für Stahl ist in Abbildung 4.9 schematisch gezeigt.

Die Kriechkurve ist durch die Bereiche

- I: primäres Kriechen
- II: sekundäres Kriechen
- III: tertiäres Kriechen

charakterisiert, wobei die einzelnen Bereiche jeweils durch abnehmende, konstante und steigende Dehnungsrate gekennzeichnet sind, wie in Abbildung 4.10 schematisch anhand des zeitlichen Verlaufs der Dehnungsrate gezeigt wird.

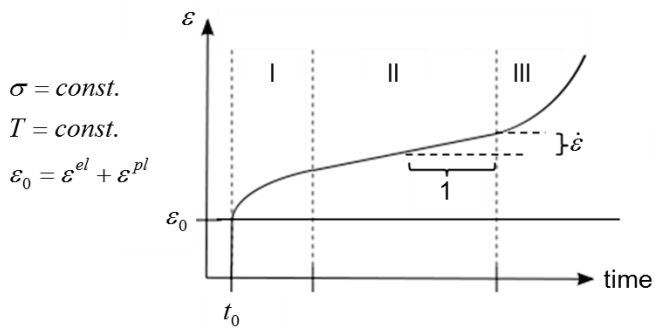


Abbildung 4.9: Schematischer Verlauf der Dehnung über der Zeit

Der Bereich des sekundären Kriechens, wo die Dehnungsrate am niedrigsten und ungefähr konstant ist, wird häufig als Design-Kriterium verwendet. Zu diesem Zweck wird der Verlauf der minimalen Dehnungsrate als Funktion der Spannung bei konstanter Temperatur aus experimentellen Daten ermittelt. Ein typischer Kurvenverlauf ist in Abbildung 4.11 dargestellt, aus dem deutlich zu erkennen ist, dass die Abhängigkeit der Dehnungsrate von der wirkenden Spannung durch einen exponentiellen Zusammenhang charakterisiert ist.

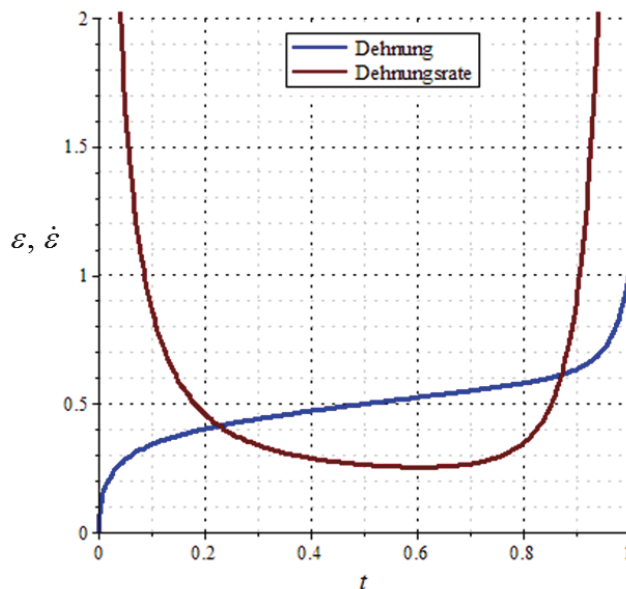


Abbildung 4.10: Schematischer Verlauf der Dehnung und Dehnungsrate über der Zeit

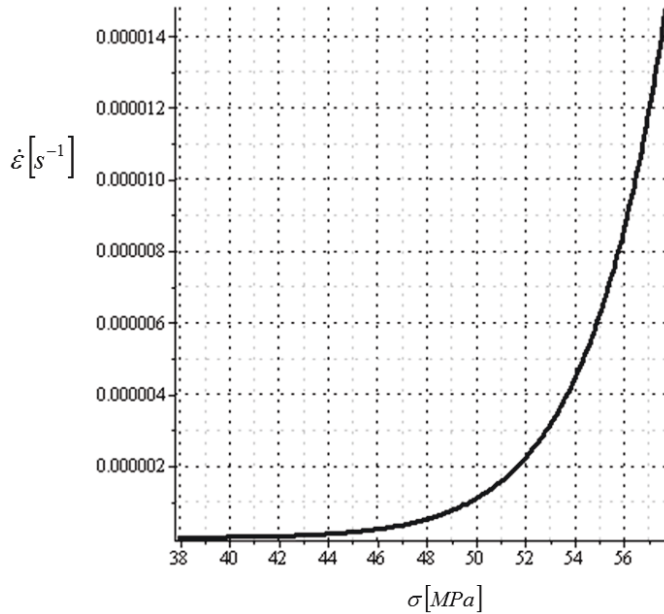


Abbildung 4.11: Verlauf der Dehnungsrate über der Spannung

Zur mathematischen Beschreibung des Kurvenverlaufs eignet sich eine Potenzfunktion gemäß dem Norton-Modell in der Form

$$\dot{\epsilon} = C_1 * \sigma^{C_2} * \exp(-C_3/T). \quad (4.46)$$

Für jeden der untersuchten Temperaturbereiche setzt man

$$C_3 = 0, \quad (4.47)$$

wodurch sich die Gleichung zum Ausdruck

$$\dot{\epsilon} = C_1(T) * \sigma^{C_2(T)} \quad (4.48)$$

vereinfacht, in dem die Temperatur als Kurvenparameter dient. In Gleichung (4.48) bezeichnen die Modellparameter C_1 und C_2 temperaturabhängige Materialkennwerte, die aus den experimentellen Daten bestimmt werden können. Abbildung 4.12 zeigt Beispiele der aus Versuchen gewonnenen Messpunkte [100]. Die entsprechenden mathematischen Modelle für den ITM-Stahl, die den Zusammenhang zwischen Spannung und Dehnungsrate bei unterschiedlichen Temperaturen beschreiben, sind ebenfalls in der Abbildung zu sehen.

Durch logarithmieren der Gleichung (4.48) gemäß

$$\log(\dot{\epsilon}) = \log(C_1) + C_2 * \log(\sigma) \quad (4.49)$$

wird deutlich, dass der Zusammenhang zwischen der Spannung und der Dehnungsrate bei logarithmischer Teilung der Achsen einen linearen Verlauf besitzt. Abbildung 4.13 zeigt die Kurvenverläufe für ITM-Stahl bei verschiedenen Temperaturen.

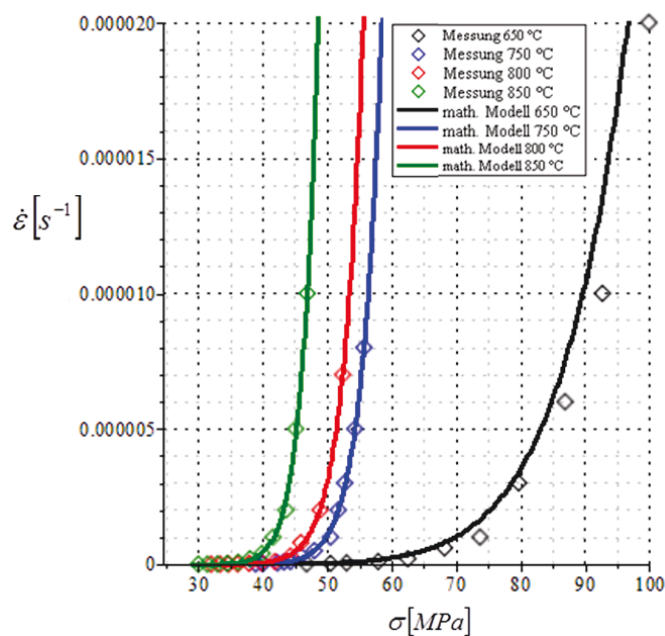


Abbildung 4.12: Verlauf der Dehnungsrate über der Spannung (lineare Teilung)

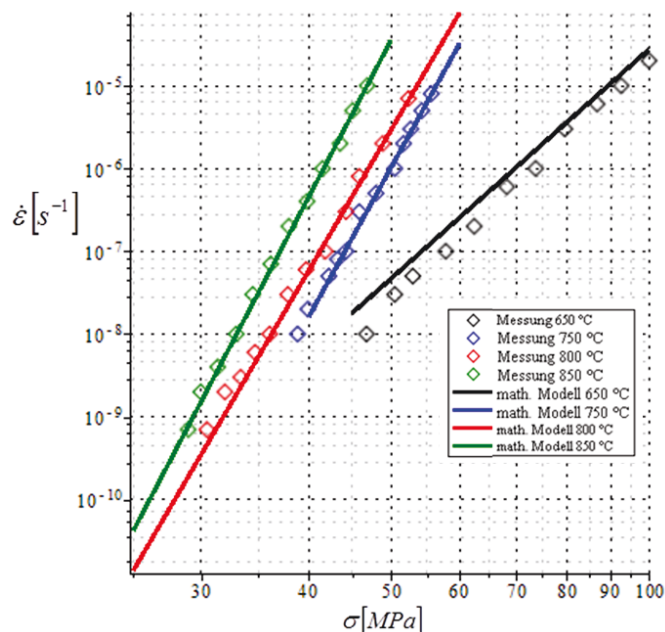


Abbildung 4.13: Verlauf der Dehnungsrate über der Spannung (logarithmische Teilung)

Die temperaturabhängigen thermischen und mechanischen Parameter der verwendeten Materialmodelle der eingesetzten Werkstoffe werden mit Hilfe der ANSYS-Programmiersprache APDL im FE-Berechnungsmodell implementiert.

4.3.4 Feinheit des Rechnernetzes

Das mechanische Verhalten des FE-Modells muss unabhängig von der Feinheit des als „Mesh“ bezeichneten Rechnernetzes sein, die einen großen Einfluss auf die Genauigkeit der ermittelten Lösung hat. Da jedoch mit steigender Feinheit des Rechnernetzes der benötigte Berechnungsaufwand größer wird, ist es erforderlich eine Balance zwischen den beiden Einflussfaktoren zu finden. Zu diesem Zweck wird das Modellverhalten unter den gleichen Randbedingungen mit verschiedenen Mesh-Feinheiten untersucht. Dabei wird das FE-Modell mit unterschiedlicher Feinheit diskretisiert und die Anzahl der Elemente solange erhöht, bis die entsprechende Variation der erzielten Lösung klein genug wird. Nach Durchführung der Simulationsberechnung ergeben sich die in Abbildung 4.14 dargestellten Ergebnisse.

Die Untersuchung der Mesh-Abhängigkeit zeigt, dass die erste Berechnung mit einer Elementanzahl von 0,4359e6 zu einer maximalen Spannung von 91,7 MPa führt. Die Erhöhung der Anzahl der Elemente auf 0,8976e6 bewirkt eine Steigerung der Spannung auf 111,73 MPa. Dies entspricht einer Zunahme von 21,8%. Ein weiterer Zuwachs der Elementanzahl auf 1,4193e6 führt zu einer Spannung von 120,9 MPa, was einen Anstieg von 8,2% bedeutet. Die letzte Erhöhung der Anzahl der Elemente auf 2,4012e6 bewirkt eine Spannungszunahme um lediglich 0,44% auf einen Wert von 121,45 MPa.

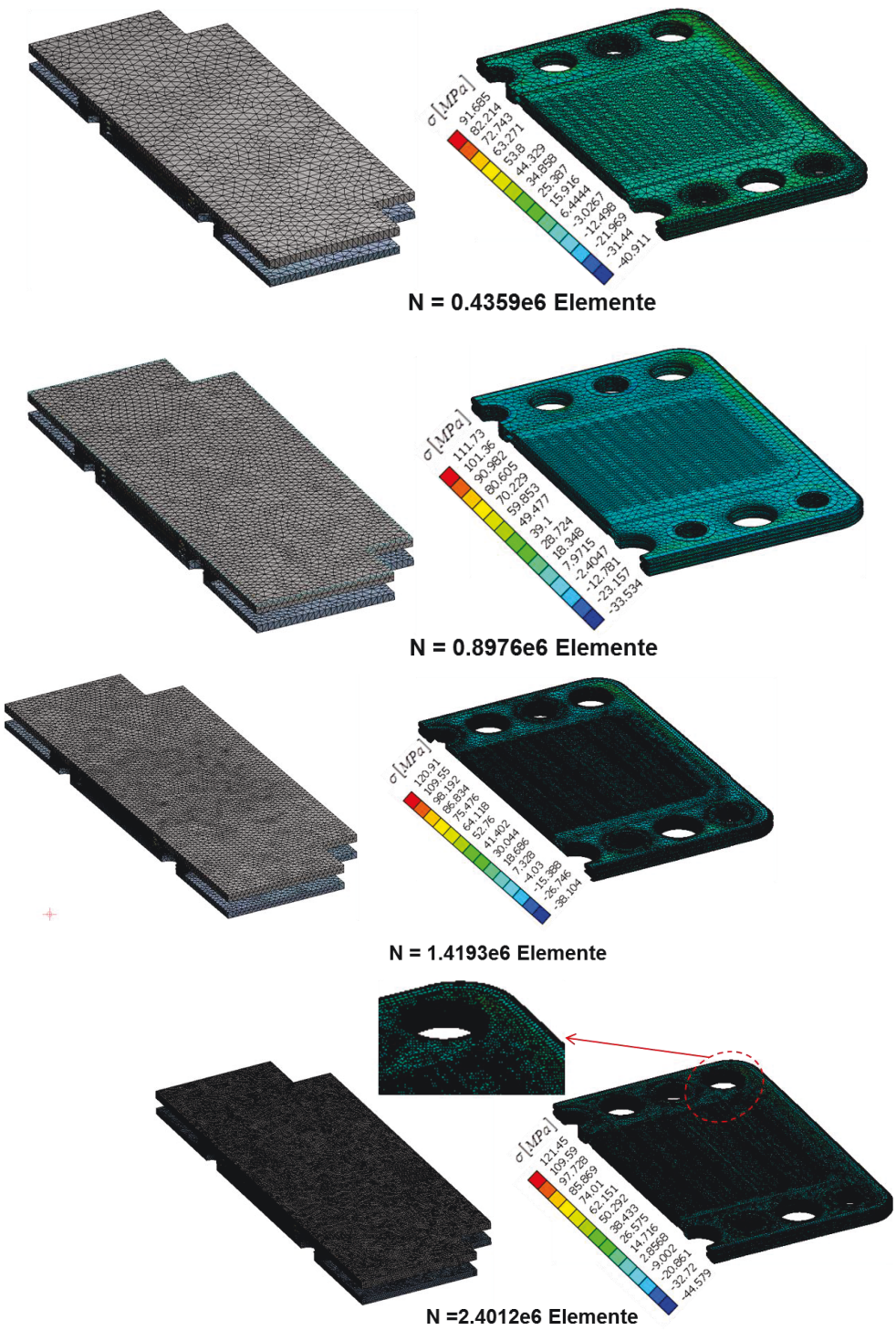


Abbildung 4.14: Mesh-Abhängigkeit des FE-Modells

Die Variation der Mesh-Feinheit zeigt deutlich, dass die Berechnung mit einer Elementanzahl von 1,4193e6 sehr gut geeignet ist und zusätzlich einen Kompromiss zwischen Mesh-Feinheit und Berechnungsaufwand darstellt. Der Zusammenhang zwischen dem maximalen Wert der ermittelten Spannung und der Anzahl der Elemente ist in Abbildung 4.15 zusammengefasst. Die Darstellung zeigt die Zunahme der Spannung mit steigender Anzahl der Elemente sowie die deutliche Konvergenz der numerischen Lösung gegen einen Endwert.

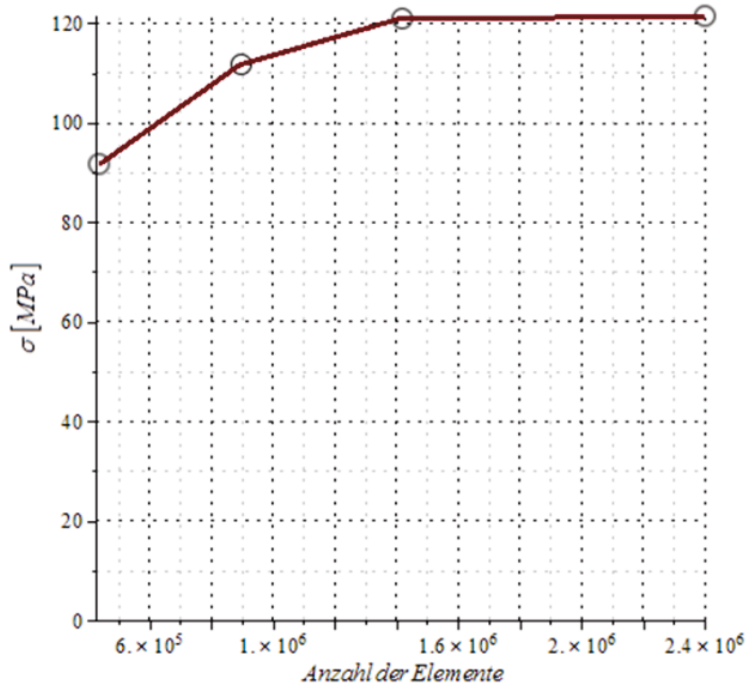


Abbildung 4.15: Konvergenz der maximalen Spannung

4.3.5 Simulationsergebnisse

4.3.5.1 Thermische Dehnungen

Wie im vorigen Abschnitt erläutert, wurden die folgenden Ergebnisse mit dem Modell ermittelt, für dessen Diskretisierung 1,4193e6 Elemente erzeugt sind. Die Abbildungen 4.16 und 4.17 zeigen die Verteilung der thermischen Dehnung im Brennstoffzellen-Stack sowie in der Kassette. In der jeweiligen Abbildung ist auch das entsprechende Temperaturprofil zum Vergleich dargestellt. Den beiden Abbildungen ist zu entnehmen, dass die maximalen Temperaturwerte identisch sind. Dagegen unterscheiden sich die minimalen Werte, die in den Ober- und Unterplatten auftreten. Demzufolge sind auch die Wertebereiche der thermischen Dehnungen unterschiedlich verteilt.

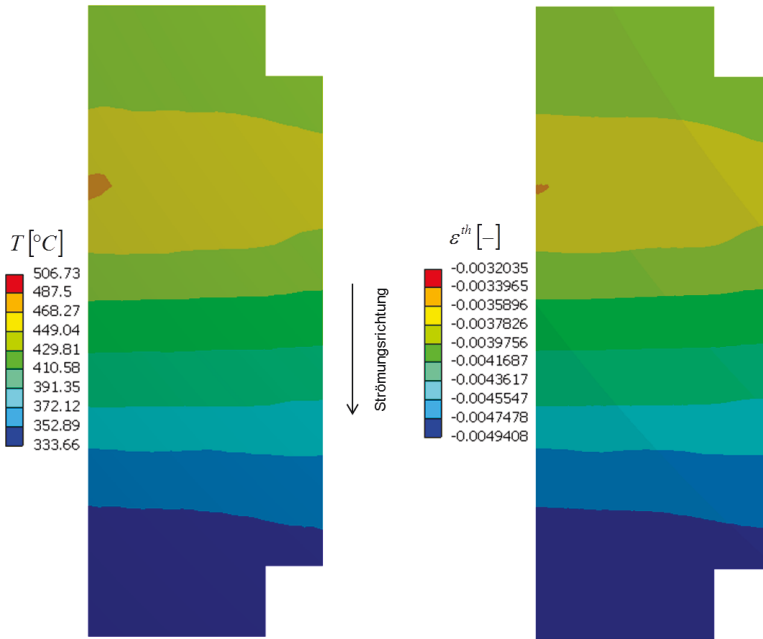


Abbildung 4.16: Verteilung der Temperatur und der thermischen Dehnung im Stack

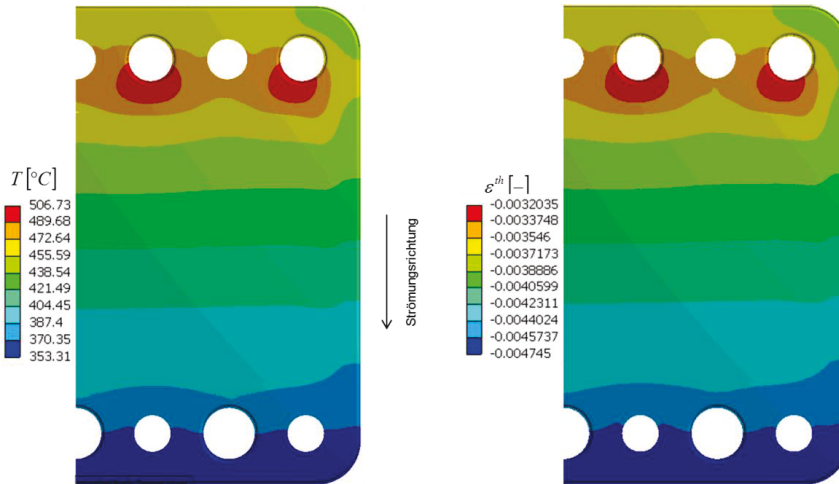


Abbildung 4.17: Verteilung der Temperatur und der thermischen Dehnung in der Kassette

In den beiden Abbildungen 4.16 und 4.17 ist deutlich zu erkennen, dass die beiden Größen T und ε^{th} ein ähnliches Profil haben, da die Komponenten des Tensors der thermischen Dehnung ε_{ij}^{th} mit der Temperatur durch die konstitutive Beziehung gemäß der Gleichung (4.1) verknüpft sind. Die Gleichung wird hier mit der expliziten Temperaturabhängigkeit des Wärmeausdehnungskoeffizienten wiedergegeben.

$$\varepsilon_{ij}^{th} = \alpha(T) * (T - T_{ref}) * \delta_{ij} \quad (4.50)$$

Die Beziehung stellt ein konstitutives materialabhängiges Modell dar, in dem $\alpha(T)$ der temperaturabhängige Wärmeausdehnungskoeffizient ist. Mit T und T_{ref} werden jeweils die vorhandene lokale Temperatur und die spannungsfreie Referenztemperatur bezeichnet. Weiterhin ist darauf zu achten, dass die Temperaturabhängigkeit der thermischen Dehnung infolge temperaturabhängiger Materialeigenschaften innerhalb eines Elementes weniger Gewichtung hat als die direkte Abhängigkeit von der Variation der Temperatur selbst. Dies ergibt sich aus der Tatsache, dass sich α innerhalb eines Elementes weniger ändert als die Temperatur.

Zum Vergleich werden die maximalen und minimalen Werte der thermischen Dehnung in den beiden verwendeten Materialien Stahl und Glas mit Hilfe des analytischen Ausdrucks für den eindimensionalen Fall gemäß Gleichung (4.51) ermittelt

$$\begin{aligned} i = j = 1 \\ \Rightarrow \varepsilon_{11}^{th} = \varepsilon^{th} = \alpha(T) * (T - T_{ref}) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Im berechneten Temperaturbereich des Stahls

$$333,66^\circ\text{C} \leq T_{Stahl} \leq 506,73^\circ\text{C} \quad (4.52)$$

liegen die entsprechenden Werte der thermischen Dehnung im Bereich zwischen -0,49% und -0,32%. Dagegen sind für die Glasktemperaturen im Intervall

$$353,5^\circ\text{C} \leq T_{Glas} \leq 478,73^\circ\text{C} \quad (4.53)$$

die entsprechenden thermischen Dehnungen im Glas zwischen -0,45% und -0,33%. Die ermittelten Werte für die jeweiligen Temperaturgrenzen stimmen sehr gut überein mit denen aus der numerischen Simulationsberechnung, die in den Abbildungen 4.16 und 4.18 abzulesen sind. Ferner schrumpft der Stack infolge der Bedingung

$$\varepsilon^{th} < 0 \quad (4.54)$$

zusammen, da

$$T(x_1, x_2, x_3) < T_{ref} = 800^\circ\text{C} , \quad (4.55)$$

gilt. Die Profile der Temperatur und der thermischen Dehnung in der Glasfügung sind in Abbildung 4.18 gezeigt. Des Weiteren ist den Abbildungen 4.16 – 4.18 zu entnehmen, dass die Temperaturen in Strömungsrichtung abnehmen, weshalb auch die thermischen Dehnungen betragsmäßig in diese Richtung steigen.

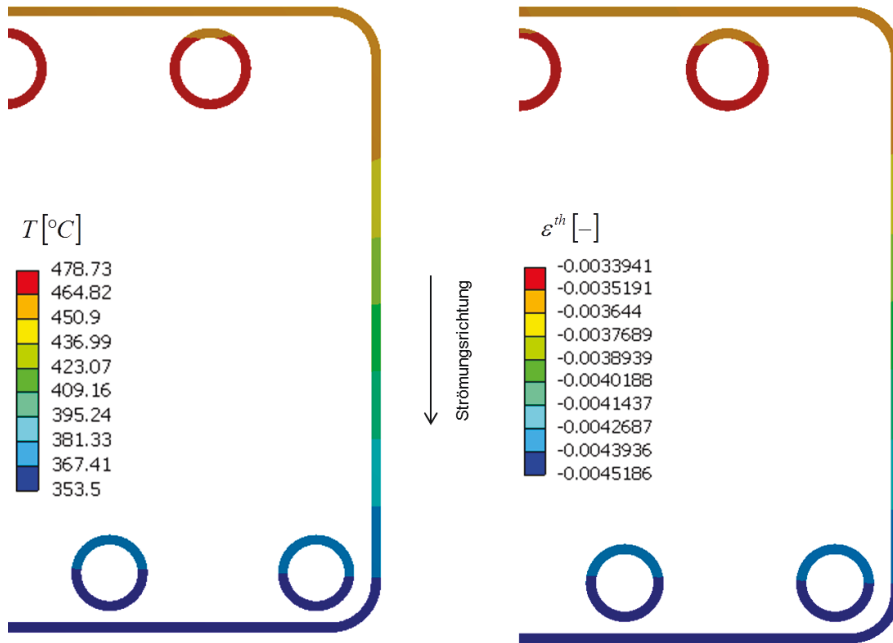


Abbildung 4.18: Verteilung der Temperatur und der thermischen Dehnung in der Glasföigung

Die strukturmekanische Analyse des Stacks richtet sich maßgeblich nach der Art eines möglichen Versagens seiner Bauelemente. Dies bedeutet, dass die Tragfähigkeit oder die Gebrauchstauglichkeit des Bauteils nicht erfüllt werden kann. In den meisten Fällen kann das Versagen durch

- Anriss oder Bruch
- Große Deformationen (Verschiebungen)
- Unzulässige plastische Dehnungen

eintreten. Daher werden im Folgenden die entsprechenden Verteilungen der physikalischen Größen

- Verzerrungsfeld
- Spannungsfeld
- Verschiebungsfeld

betrachtet. Die Verschiebung beschreibt die absolute Deformation der Struktur und ist von den geometrischen Abmessungen eines Bauteils abhängig. Dagegen ist die Verzerrung ein Maß für die Verformung, welches von der Geometrie der betrachteten Struktur nicht abhängt. Die Spannung charakterisiert die innere Beanspruchung des Bauteils infolge äußerer Belastung.

4.3.5.2 Mechanische Verzerrungen

Die aufgrund der thermischen Dehnung verursachten Deformationen werden an einigen Stellen im Stack durch mechanische Auflagerung, Materialinhomogenität oder ungleichmäßige Temperaturverteilung behindert. Dies führt zu mechanischen Verzerrungen, die mit den Spannungen durch das entsprechende Materialmodell verknüpft sind. Durch die verursachten Spannungen sind steife Stack-Komponenten, wie die obere und untere Platte und die Ringrahmen weniger gefährdet, da sie über große Querschnittsflächen verfügen. Im Gegensatz hierzu sind die dünnwandigen Elemente, wie Ober- und Unterschale, empfindlich, weshalb die mechanischen Dehnungen in diesen Komponenten betrachtet werden. Zur Darstellung der Verzerrungen werden im Stahl die von Mises Vergleichsdehnung und im Glas die maximale Hauptdehnung gewählt.

Aufgrund des Temperaturgradienten im Einströmbereich der heißen Gase treten dort die maximalen mechanischen Dehnungen auf, wie in Abbildung 4.19 dargestellt. Die Detailansicht in Abbildung 4.20 verdeutlicht, dass in einem Verbindungsbereich der Oberschale mit der Unterschale die Höchstwerte der Dehnung auftreten. Somit stellt die Schweißverbindung im betrachteten Bereich einen Ort dar, wo möglicherweise hohe Spannungen verursacht werden.

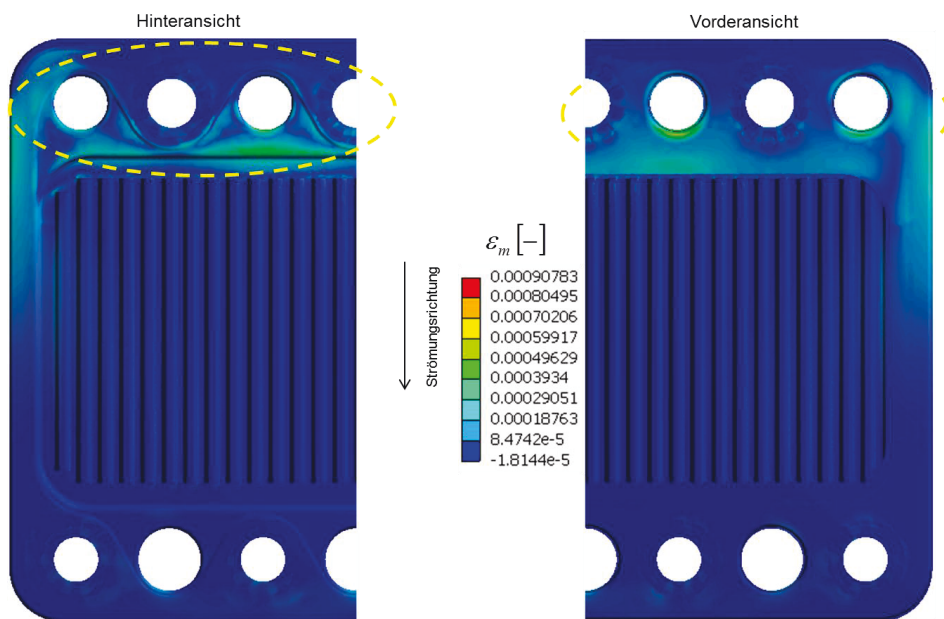


Abbildung 4.19: Verteilung der mechanischen Dehnung in der Ober- und Unterschale

Weitere Bereiche im Stack, wo hohe mechanische Verzerrungen existieren können, stellen die Glasfügung und die Zelle dar. Die in den Abbildungen 4.21 und 4.22 gezeigten Stellen sind Bereiche, wo Temperaturgradienten oder Materialinhomogenität vorliegen. Unter den in dieser Analyse angenommenen Randbedingungen sind die verursachten mechanischen Verzerrungen sehr gering.

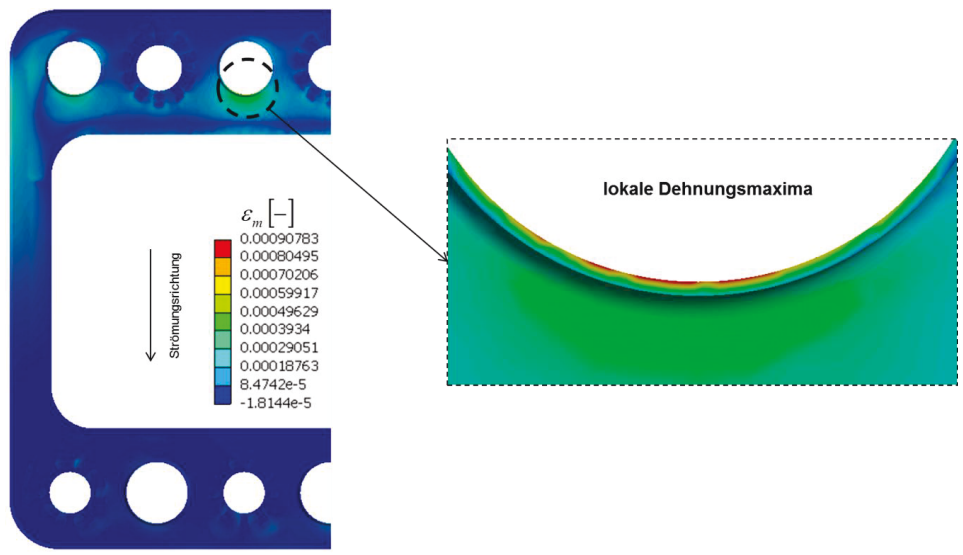


Abbildung 4.20: Maximale mechanischen Dehnung in der Oberschale

Wie bereits erwähnt, dienen die Verzerrungen als Maß für die Deformation der Struktur und eignen sich für den Vergleich des Verformungsgrades verschiedener Komponenten, da die Verzerrungen im Gegensatz zu den absoluten Verschiebungen von der Geometrie der Struktur unabhängig sind. Ferner kann anhand der Größe der Verzerrung und auf Basis des experimentell untersuchten Materialverhaltens ermittelt werden, ob die Deformationen rein elastisch sind oder bleibende Anteile enthalten.

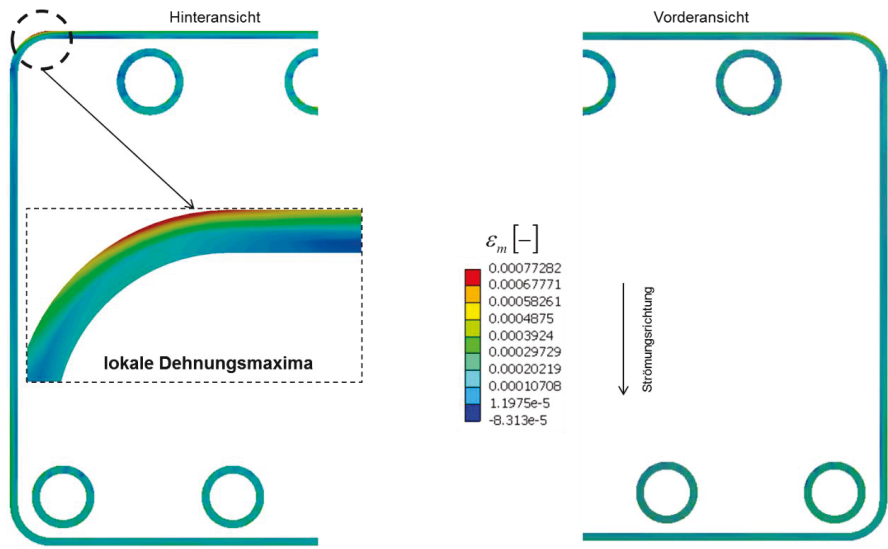


Abbildung 4.21: Verteilung der mechanischen Dehnung im der Glasföngung

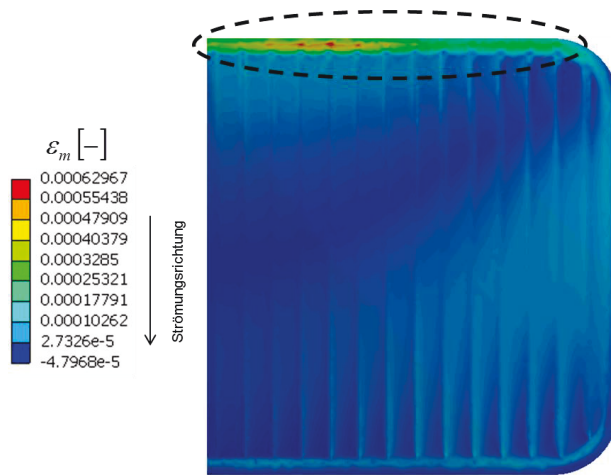


Abbildung 4.22: Verteilung der mechanischen Dehnung in der Zelle

4.3.5.3 Spannungsverteilung

Wie bereits im Abschnitt 4.2 erläutert, sind die mechanischen Verzerrungen mit den Spannungen durch das Materialgesetz verknüpft, weshalb die Profile der räumlichen Verteilung beider Größen ähnlich sind. Der Vergleich der entsprechenden Darstellungen der jeweiligen Stack-Komponenten lässt diesen Zusammenhang deutlich erkennen. Wie bei der Betrachtung der mechanischen Verzerrungen werden auch hier zur Darstellung der Spannungen im Stahl die von Mises Vergleichsspannung und im Glas die maximale Hauptspannung gewählt. In Abbildung 4.23 ist die Spannungsverteilung in der Ober- und Unterschale zu sehen.

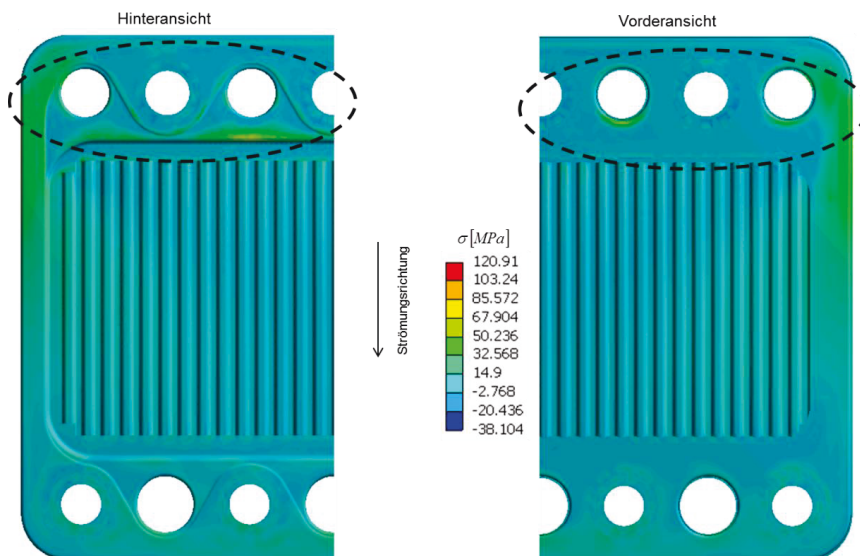


Abbildung 4.23: Verteilung der Spannung in der Ober- und Unterschale

Auch hier treten die maximalen Werte der Spannung in der Umgebung des Einströmbereichs der heißen Gase auf. Weiterhin ist noch zu berücksichtigen, wie bereits bei der fluidodynamischen Analyse aufgefallen ist, dass die Temperaturverteilung in diesem Bereich ungleichmäßig ist und folglich hohe Temperaturgradienten vorliegen. Diese gelten als Ursache für das Auftreten von hohen thermischen Spannungen. Unter den vorhandenen mechanischen und thermischen Randbedingungen liegen die höchsten Spannungen im Stahl bei ungefähr 120 MPa, die in einem Verbindungsbereich der Oberschale mit der Unterschale auftreten. Unter den verwendeten Randbedingungen wird die Fließgrenze im Stahl nicht erreicht, weshalb keine plastischen Deformationen auftreten. Im betrachteten Bereich der Spannungsspitzen, wie in Abbildung 4.24 gezeigt, verläuft eine Schweißnahtverbindung. Aus diesem Grund haben die Spannungen an diesem Ort großen Einfluss auf das Verbundverhalten, von dem die Abdichtung des Stacks und folglich seine Funktionalität abhängen.

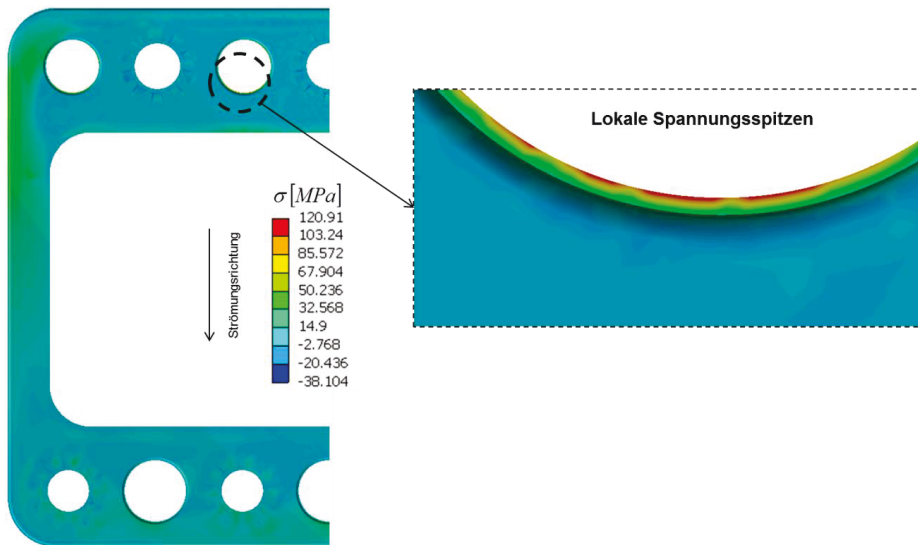


Abbildung 4.24: Orte der maximalen Spannungen

Die Glasfügung ist eine weitere Komponente des Stacks, die Zugspannungen gegenüber sehr empfindlich ist. Die Spannungsverteilung im Glaskörper ist in Abbildung 4.25 dargestellt. Eine maximale Zugspannung von 46,3 MPa wird ermittelt, die im gekennzeichneten Bereich auftritt. In der Zelle erreichen die maximalen Spannungen Werte von ungefähr 32 MPa und liegen im Anschlussbereich der Zelle an der Oberschale, wie in Abbildung 4.26 zu sehen ist. Auch hier handelt es sich um einen Verbundbereich, wo die Zelle in die Oberschale eingeschweißt ist. Insbesondere bei der hier eingesetzten metallgestützten Zelle ist die Schweißverbindung aufgrund ihrer hohen Verbundfestigkeit gut geeignet.

Zusammenfassend wird festgestellt, dass die höchsten Werte der Spannungen in den Übergangsbereichen zwischen den verschiedenen Stack-Komponenten auftreten, wo die Lasten eingeleitet werden und ein Verbund zwischen den Stack-Elementen besteht. Hohe Temperaturgradienten sowie Materialinhomogenität sind meistens die Ursache für die Spannungsspitzen. Beide Einflussfaktoren spielen eine entscheidende Rolle beim thermomechanischen

Verhalten des Stacks und führen zu lokalen sprunghaften Änderungen in den Struktursteifigkeiten, die durch die Geometrie und die temperaturabhängigen Parameter der verwendeten Materialmodelle definiert sind. Daher erfordert die Reduzierung der thermischen Spannungen in der Grenzflächenumgebung der einzelnen Elemente Maßnahmen, die gleichzeitig zu einer gleichmäßigen Temperaturverteilung und zur Verträglichkeit des Verformungsverhaltens der Stack-Komponenten führen. Insbesondere die Wärmeausdehnungskoeffizienten der einzelnen Strukturelemente müssen angepasst sein, damit sich keine großen Unterschiede der thermischen Dehnung bilden, die folglich zu thermischen Spannungen führen.

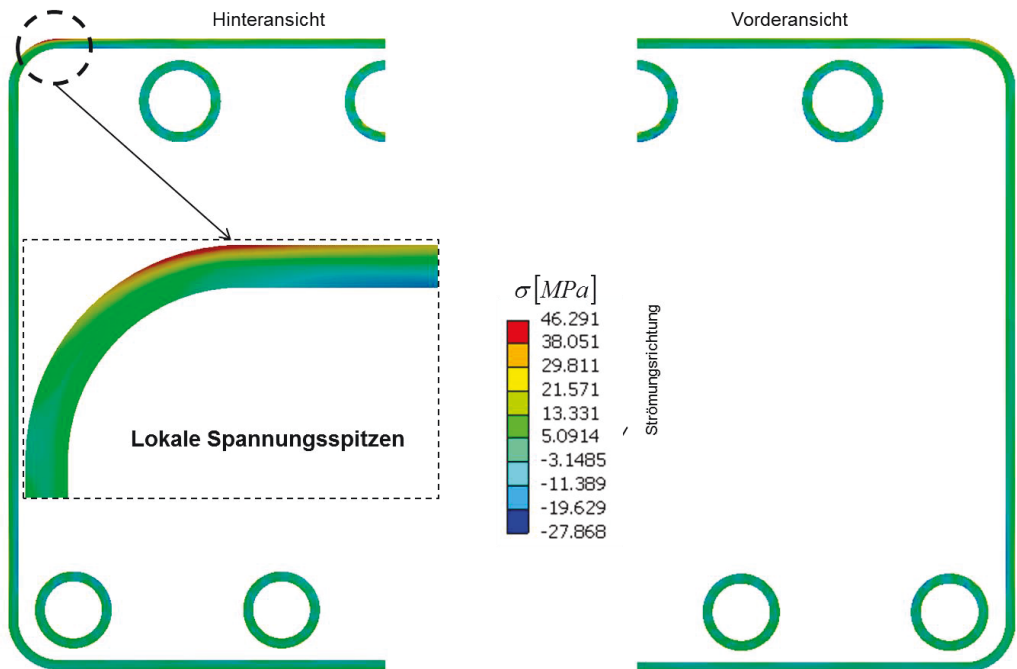


Abbildung 4.25: Verteilung der Spannung in der Glasfügung

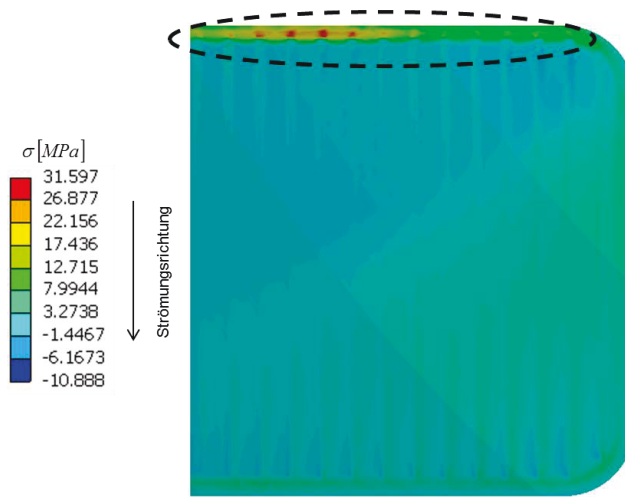


Abbildung 4.26: Verteilung der Spannung in der Zelle

4.3.5.4 Verschiebungsfeld

Die Ermittlung der Stack-Deformationen ist ein wichtiger Bestandteil der thermomechanischen Analyse, da die Gebrauchstauglichkeit des Stacks vom Verformungsgrad seiner Komponenten abhängt. In Abbildung 4.27 ist das Verschiebungsprofil im Stack dargestellt. Hohe Werte der Verschiebung treten in den Eckbereichen des Stacks auf, da an diesen Stellen große Deformationsfreiheit vorhanden ist. Zusätzlich steigen die Temperaturdifferenzen relativ zur spannungsfreien Referenztemperatur in Strömungsrichtung, weshalb die maximalen Verschiebungswerte in unteren Bereich der Abbildung zu sehen sind.

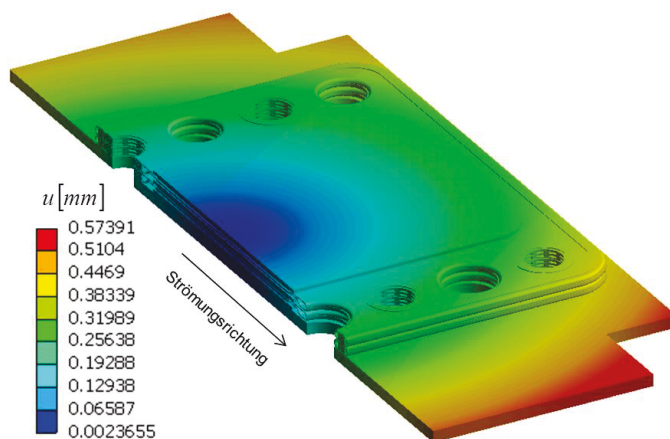


Abbildung 4.27: Verschiebungsprofil im Stack

Wie die Abbildung zeigt, besitzt das Verschiebungsfeld des Stacks im mittleren Bereich zwischen Ein- und Ausströmung eine näherungsweise kreissymmetrische Verteilung. Dies ist zu erwarten, wenn die Struktur als ein Verbund aus mehreren Komponenten betrachtet wird und sich unter der gegebenen thermischen Last verformt. Der Ausströmungsbereich des Stacks erfährt eine Verschiebungsverteilung, die von diesem charakteristischen Profil abweicht, was auf die, global betrachtet, inhomogene Temperaturverteilung zurückzuführen ist. Infolge abnehmender Temperaturen in Strömungsrichtung sind die Deformationen in der Umgebung des Ausströmungsbereichs größer, was zu einer Verzerrung der konzentrischen Kreise führt. Die charakteristischen Verschiebungsprofile der einzelnen Komponenten einer Kassette sind in den Abbildungen 4.28 und 4.29 dargestellt. In Ober- und Unterschale sowie in der Glasfü- gung haben die maximalen Verschiebungswerte die gleiche Größenordnung und betragen ungefähr 0,42 mm. Die Verschiebungsverteilung in der Zelle ist gleichmäßiger, wobei ein Höchstwert von 0,32 mm erreicht wird. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die größten De- formationen in der x_1, x_2 -Ebene stattfinden. Die Verschiebungskomponente in x_3 -Richtung ist, verglichen mit den anderen Komponenten, sehr gering. Dies liegt daran, dass in diese Rich- tung eine äußere Drucklast sowie die dadurch verursachten Auflagerreaktionen wirken. Die- se Randbedingungen, die für die Kontaktierung im Stack erforderlich sind, schränken die Bewegungsfreiheit der Struktur ein.

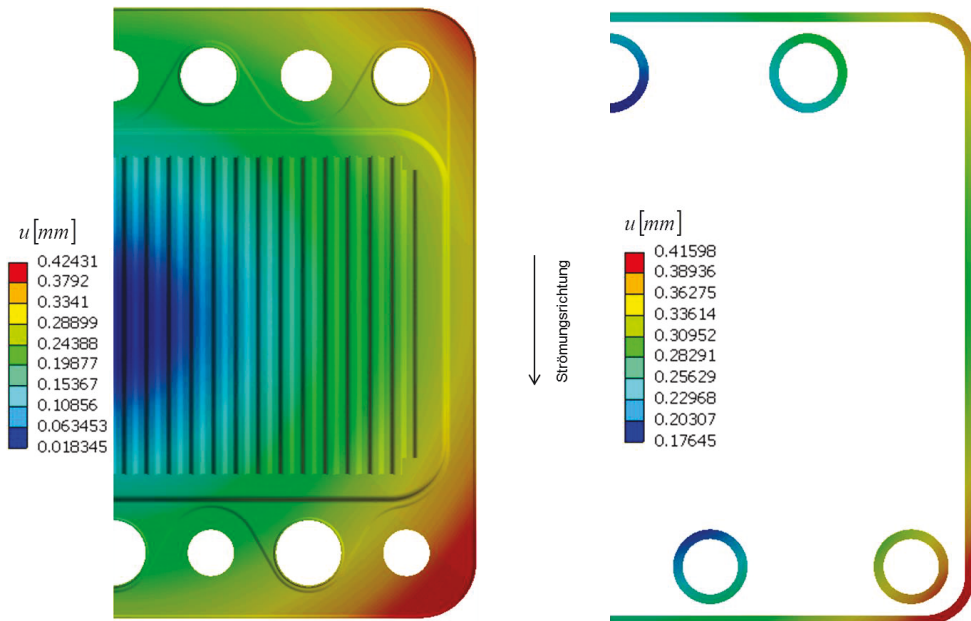


Abbildung 4.28: Verschiebungsprofil in Unterschale und Glasfü- gung

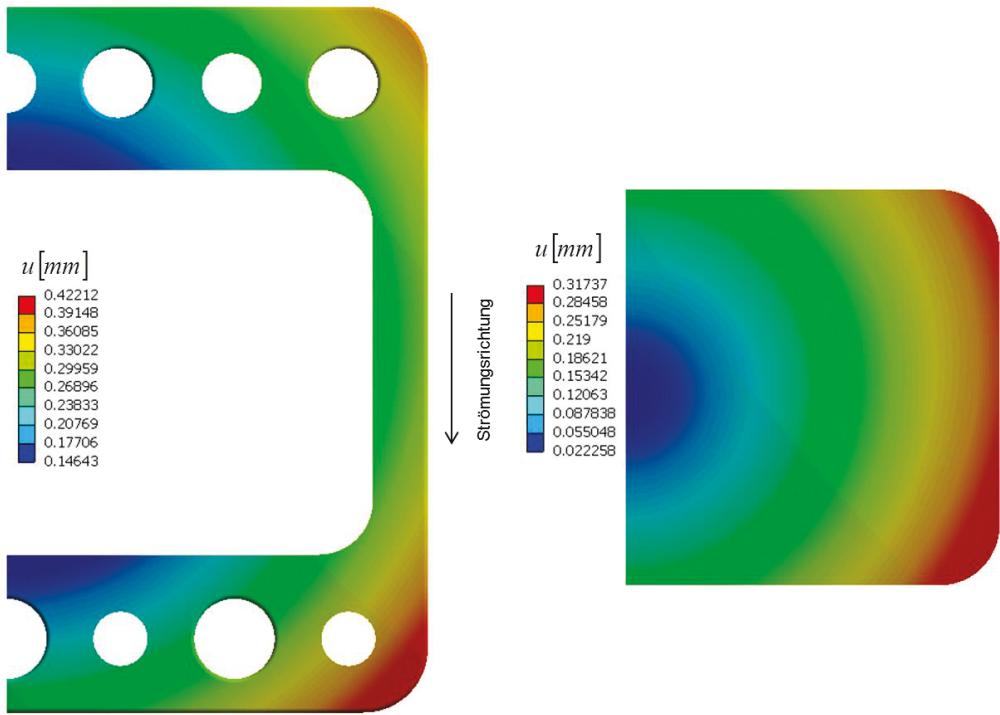


Abbildung 4.29: Verschiebungsprofil in Oberschale und Zelle

Zur Überprüfung der Plausibilität des Verschiebungsfeldes betrachtet man eine Fläche in der x_1, x_2 -Ebene der Zelle, die in Abbildung 4.30 dargestellt ist. Die Fläche ist durch die Bereiche

$$0 \leq x_1 \leq B \quad (4.56)$$

und

$$\frac{-L}{2} \leq x_2 \leq \frac{L}{2} \quad (4.57)$$

definiert, wobei B und L jeweils die Breite und die Länge der Fläche bezeichnen, die mit den Abmessungen der Zelle übereinstimmen. Ferner stellen die Achsen $x_1 = 0$ und $x_2 = 0$ Symmetrieachsen des Verschiebungsfeldes dar, dessen Komponenten unter den gegebenen Voraussetzungen die Formen

$$u_1 = u_1(x_1, x_2) \quad (4.58)$$

und

$$u_2 = u_2(x_1, x_2) \quad (4.59)$$

annehmen. Unter der Wirkung einer thermischen Last durch die gleichmäßige Temperaturänderung θ relativ zur spannungsfreien Referenztemperatur entstehen in der Fläche die Dehnungen

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \alpha * \theta \quad (4.60)$$

Mit Hilfe der geometrischen Beziehungen nach Gleichung (4.9) ergeben sich für die Verschiebungen die Zusammenhänge

$$u_{1,1} = \varepsilon_{11} = \alpha * \theta \quad (4.61)$$

und

$$u_{2,2} = \varepsilon_{22} = \alpha * \theta \quad (4.62)$$

Die Integration nach der jeweiligen Koordinate liefert die Gleichungen

$$u_1(x_1, x_2) = \alpha * \theta * x_1 + f_1(x_2) \quad (4.63)$$

und

$$u_2(x_1, x_2) = \alpha * \theta * x_2 + f_2(x_1) \quad (4.64)$$

Unter Berücksichtigung der Randbedingungen gemäß

$$u_1(0, x_2) = 0 \quad (4.65)$$

und

$$u_2(x_1, 0) = 0 \quad (4.66)$$

gilt für die unbekannten Funktionen der Zusammenhang

$$f_1(x_2) = f_2(x_1) = 0 \quad (4.67)$$

und die Verschiebungsfunktionen erhalten die Formen

$$u_1(x_1) = \alpha * \theta * x_1 \quad (4.68)$$

und

$$u_2(x_2) = \alpha * \theta * x_2 \quad (4.69)$$

Die Gesamtverschiebung an einem Punkt des Kontinuums wird durch den Betrag des Verschiebungsvektors gemäß

$$u(x_1, x_2) = \sqrt{[u_1(x_1)]^2 + [u_2(x_2)]^2} = \alpha * \theta * \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \quad (4.70)$$

beschrieben. Wie Abbildung 4.30 zeigt, stellt die letzte Gleichung im x_1, x_2 -Raum eine Schar konzentrischer Kreise dar, welche die Isolinien des Verschiebungsfeldes repräsentieren und vergleichbar mit der Darstellung im rechten Teil der Abbildung 4.29 sind. Es ist noch zu berücksichtigen, dass die vorige Herleitung auf einer gleichmäßigen Temperaturverteilung über die betrachtete Fläche basiert. Bei einer Abweichung von dieser Annahme durch die Existenz eines Temperaturgradienten werden die konzentrischen Kreise verzerrt und die kreis-symmetrische Verschiebungsverteilung verschwindet, wie im Abschnitt 6.2.2.5 gezeigt wird.

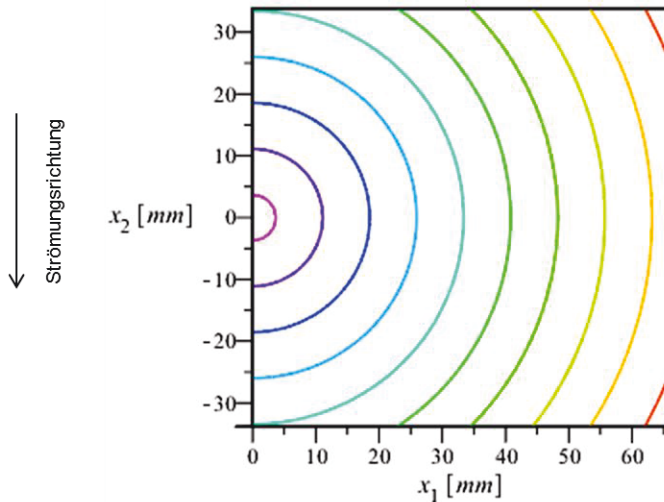


Abbildung 4.30: Isolinien des Verschiebungsfeldes

4.3.6 Experimentelle Validierung des thermomechanischen Modells

Die Validierung der Berechnungsergebnisse ist ein wichtiger Bestandteil des Simulationsprozesses, um sicher zu stellen, dass das aufgestellte Modell das Verhalten der realen Struktur innerhalb der zulässigen Toleranzen ausreichend genau beschreibt und die getroffenen Modellannahmen sinnvoll sind. Hierzu werden die mit Hilfe des FE-Modells ermittelten Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten verglichen. Diese stammen aus Schadensbildern der Stack-Komponenten, die nach mehreren Prozesszyklen gewonnen werden [102]. Ein Versuchsstand, an dem Messungen der Stack-Temperaturen durchgeführt werden, ist in Abbildung 4.31 dargestellt.

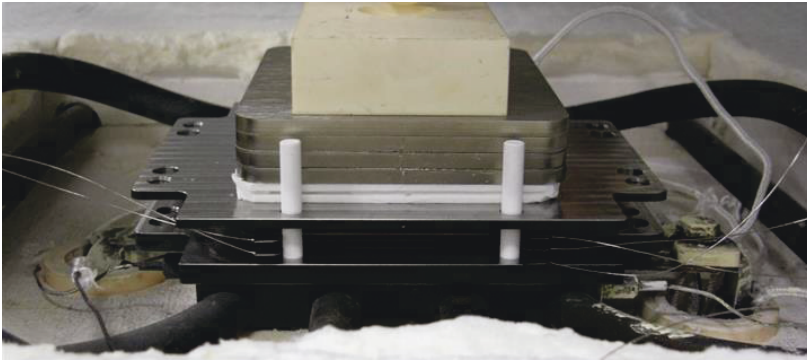


Abbildung 4.31: Prüfstand des SOFC-Stacks

Zunächst werden aus den Berechnungsergebnissen der fluiddynamischen Analyse die Verteilungen der Temperatur und des Temperaturgradienten im SOFC-Stack ermittelt. Wie im Abschnitt 3.4 erläutert wurde, liegen die Höchstwerte beider Größen in der Umgebung der Einströmbereiche der heißen Gase, wie Abbildung 4.32 in der Ober- und Unterschale verdeutlicht.

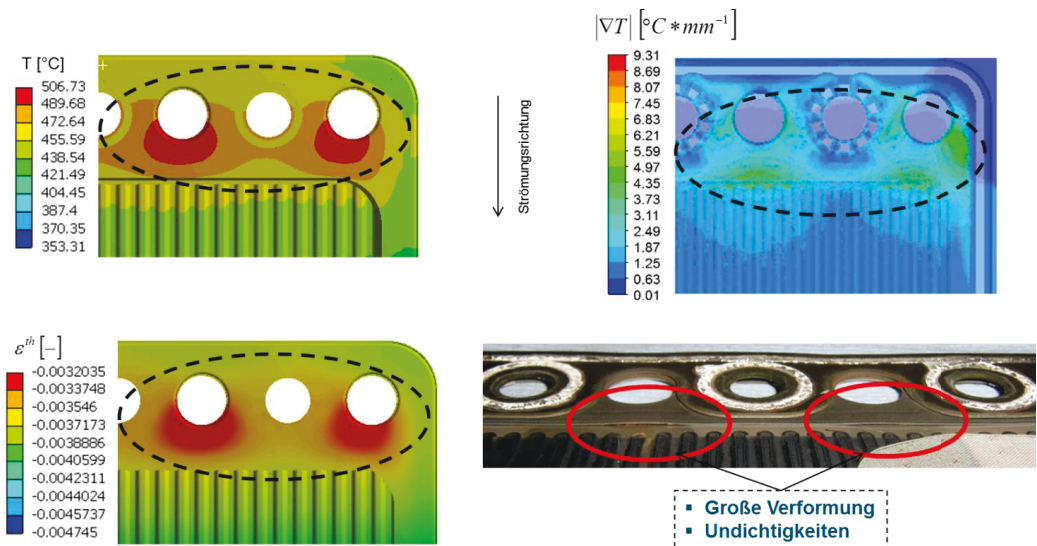


Abbildung 4.32: Modellvalidierung, Vergleich der thermischen Effekte mit dem Schadensbild

Basierend auf den ermittelten fluiddynamischen Ergebnissen wird anschließend mit Hilfe der thermomechanischen Analyse die Verteilung der thermischen Dehnung berechnet, die im unteren Teil der Abbildung 4.32 dargestellt ist. Erwartungsgemäß liegen in den Einströmbereichen der heißen Gase auch höhere Gradienten der thermischen Dehnung als Folge der dort vorhandenen Temperaturgradienten. In der Abbildung ist ebenfalls der verformte Be-

reich aus den Schadensbildern gezeigt, wo deutlich zu erkennen ist, dass die gefährdeten Gebiete in der Simulation und im Versuch sehr gut übereinstimmen.

Ferner zeigen die Berechnungen, dass in den kritischen Bereichen große Deformationen und Verschiebungsgradienten existieren, wie in Abbildung 4.33 in der Ober- und Unterschale zu sehen ist.

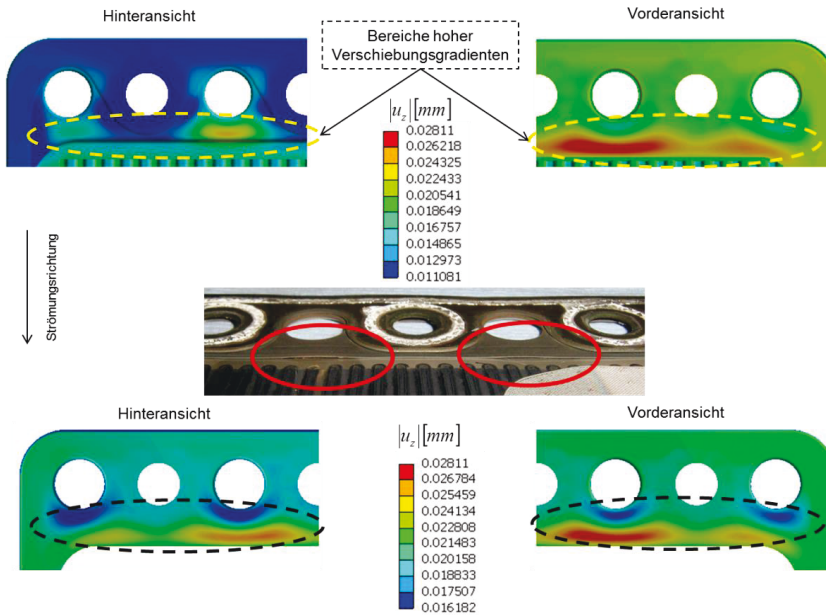


Abbildung 4.33: Modellvalidierung, Vergleich der Deformationen mit dem Schadensbild

Zur weiteren Erläuterung und zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten ist in Abbildung 4.34 die vertikale Verschiebung in der Oberschale entlang der gekennzeichneten Kante als Ortsfunktion dargestellt. Die Verschiebungsfunktion besitzt zwei lokale Maxima, die mit den Stellen der größten Verformungen im Schadensbild übereinstimmen. Das Beulen der dünnwandigen Struktur an den markierten Stellen wird durch die niedrigere lokale Steifigkeit hervorgerufen. Im Vergleich dazu ist der umgebende Bereich durch den Rahmen versteift und stabilisiert.

In Übereinstimmung mit den Versuchen zeigen die Berechnungsergebnisse, dass die Einstömbereiche der heißen Gase gefährdete Orte darstellen, wo möglicherweise Verbundversagen und somit Undichtigkeiten auftreten können. Um dies zu verhindern, ist es erforderlich, die Inhomogenität des Temperaturfeldes zu reduzieren und die physikalischen Eigenschaften der verwendeten Werkstoffe aufeinander anzupassen. Diese beiden Maßnahmen sind maßgeblich für die Minimierung der verursachten thermischen Spannungen.

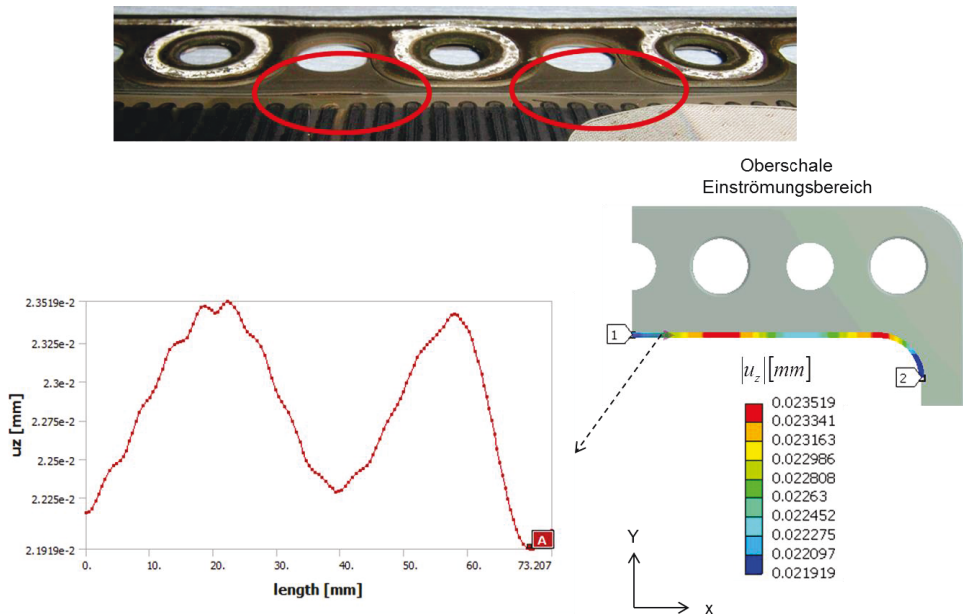


Abbildung 4.34: Modellvalidierung, vertikale Verschiebung entlang der Oberschalenkante 1-2

Mit Hilfe des validierten Berechnungsmodells ist es nun möglich, das thermomechanische Verhalten des SOFC-Stacks vorherzusagen. Die Simulationsberechnungen liefern zuverlässige Daten über die kritischen Orte im Stack, wo hohe Spannungen oder Verformungen auftreten können. Diese Ergebnisse bilden die Grundlage für weitere Analysen zwecks Designoptimierung, um die auftretenden thermischen Spannungen zu reduzieren.

4.3.7 Multistep-Submodeling-Technik

Die Submodeling-Technik ist ein Verfahren der FE-Analyse, welches eingesetzt wird, um genauere Berechnungsergebnisse in einem bestimmten Bereich eines FE-Modells mit Hilfe eines feineren lokalen Rechennetzes zu erzielen. Da die Analyse des ganzen Modells mit einem feinen Rechennetz sehr berechnungsintensiv und zeitaufwendig ist, besteht die Möglichkeit, ein bestimmtes Teilmodell oder einen Bereich des Modells, beispielsweise den Bereich mit den höchsten Spannungen, feiner zu vernetzen und isoliert vom restlichen Modell zu analysieren [103]. Diese Technik ist insbesondere bei der Berechnung von Strukturen mit komplexer Geometrie, wie es bei den betrachteten SOFC-Strukturen der Fall ist, sehr nützlich. In solchen Situationen interessiert man sich für die Orte der maximalen Spannungen, die im Allgemeinen an mehreren Stellen der Struktur auftreten. Die Möglichkeit, einzelne Modellbereiche isoliert vom restlichen Modell zu betrachten, ist ein sehr hilfreiches Werkzeug, um den Berechnungsaufwand zu reduzieren.

Um eine vollständige Randwertaufgabe am Teilmodell zu definieren, bedarf es der Beschreibung der Randbedingungen des zu betrachtenden Teilbereichs. Hierzu müssen die Auswirkungen des restlichen Modells auf das zu untersuchende Teilmodell ermittelt werden. Zu diesem Zweck wird zunächst das Gesamtmodell mit einem groben Rechennetz analysiert. An-

schließlich werden im Interfacebereich zwischen Teil- und Restmodell die Knotenverschiebungen oder –lasten als Randbedingungen am feinvernetzten Teilmodell appliziert. Hierzu werden die übertragenen Verschiebungen auf das feiner vernetzte Teilmodell interpoliert. Somit ist die zu lösende Randwertaufgabe vollständig beschrieben. Um einen genaueren Transfer der Randbedingungen zu sichern, wird die „Shape-Function“-Interpolationstechnik [99] eingesetzt. Die gleiche Technik wird beim Übertragen der thermischen Last aus der fluiddynamischen Analyse auf das FE-Modell zwecks der thermomechanischen Berechnung angewendet, wie im Abschnitt 4.3.1 erläutert wurde.

Im Folgenden wird die Vorgehensweise anhand eines Beispiels erläutert, wobei als Materialkombination für die Berechnung Stahl aus der Legierung Crofer 22 APU und Glas G87 verwendet werden. In Abbildung 4.35 werden die Schritte zusammengefasst, die für Simulationsberechnung mit Hilfe der Submodeling-Technik erforderlich sind.

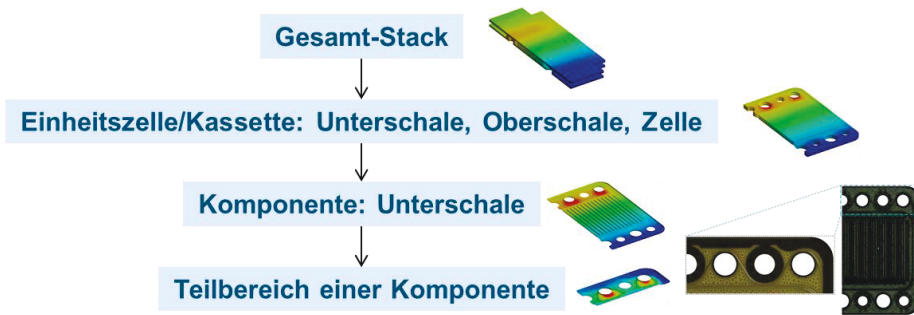


Abbildung 4.35: Multistep-Submodeling-Technik

Als thermische Last wird die in Abbildung 4.36 dargestellte Temperaturverteilung betrachtet, die mit einer fluiddynamischen Analyse ermittelt wurde. Die Abbildung zeigt die Temperaturprofile im Stack und in einer Kassette. Die mechanischen Randbedingungen sind die gleichen wie im Abschnitt 4.3.1.

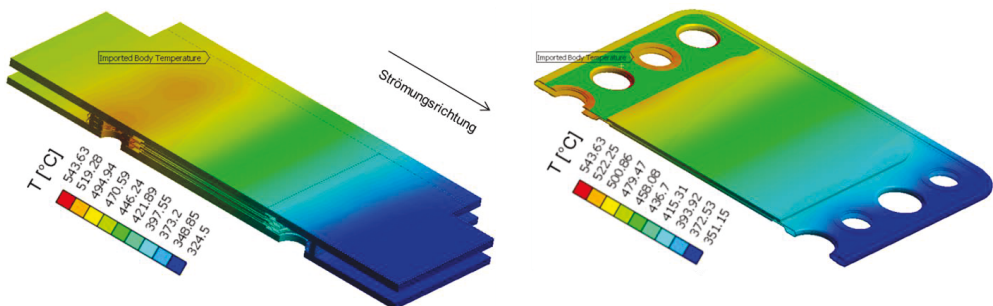


Abbildung 4.36: Temperaturverteilung im Stack und in der Kassette

Aus der Analyse des Deformationsverhaltens des Gesamtmodells lässt sich die Verteilung der Verschiebung bestimmen. Anschließend werden die Knotenverschiebungen im Interfacebereich zwischen der Kassette und dem restlichen Modell auf die Kassette als Randbedingungen der nachfolgenden Berechnung übertragen, wie Abbildung 4.37 zeigt.

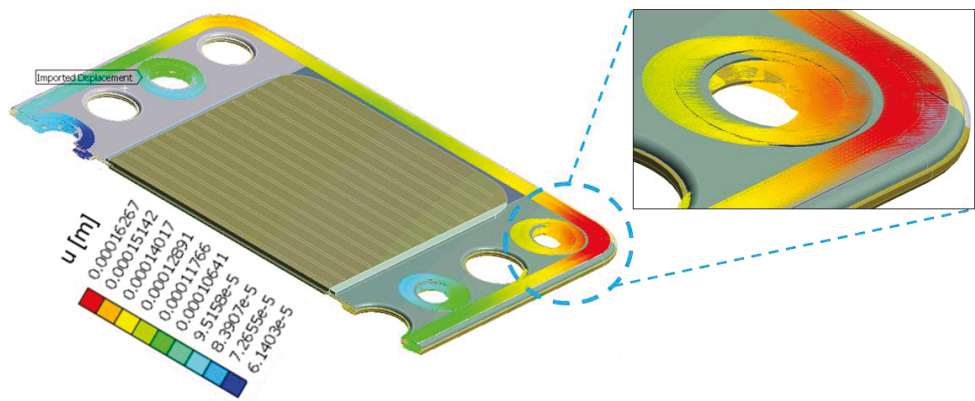


Abbildung 4.37: Verschiebungsrandbedingungen des Teilmodells

Nach der Analyse der Kassette wird im nächsten Schritt die Unterschale als Teilmodell betrachtet. Abbildung 4.38 zeigt die aus der fluiddynamischen Analyse gewonnene Temperaturverteilung und die aus der FE-Berechnung ermittelten Verschiebungen im Interfacebereich zwischen der Kassette und der Unterschale.

Die Verteilung der Spannung sowie der plastischen Dehnung in der Unterschale sind in Abbildung 4.39 dargestellt. Dabei treten die maximalen Werte beider Größen im Einströmungsbereich der Gase auf. Dies ist hauptsächlich auf die in dieser Umgebung vorhandenen hohen Temperaturgradienten zurückzuführen.

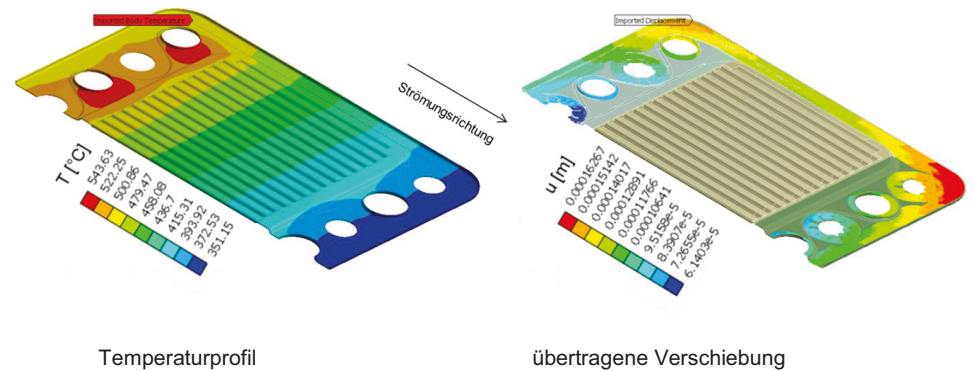


Abbildung 4.38: Temperatur und Verschiebungsrandbedingungen der Unterschale

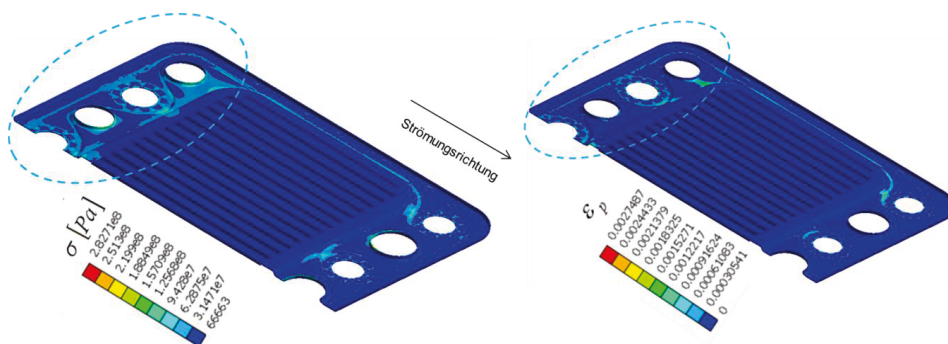


Abbildung 4.39: Verteilung der Spannung und der plastischen Dehnung in der Unterschale

Zur Untersuchung des Kriechverhaltens wird der Teilbereich der Unterschale betrachtet, in dem die höchsten Spannungen auftreten, wie Abbildung 4.40 zeigt. Hierbei wird der Teilbereich noch feiner vernetzt, wie in der Abbildung deutlich zu erkennen ist.

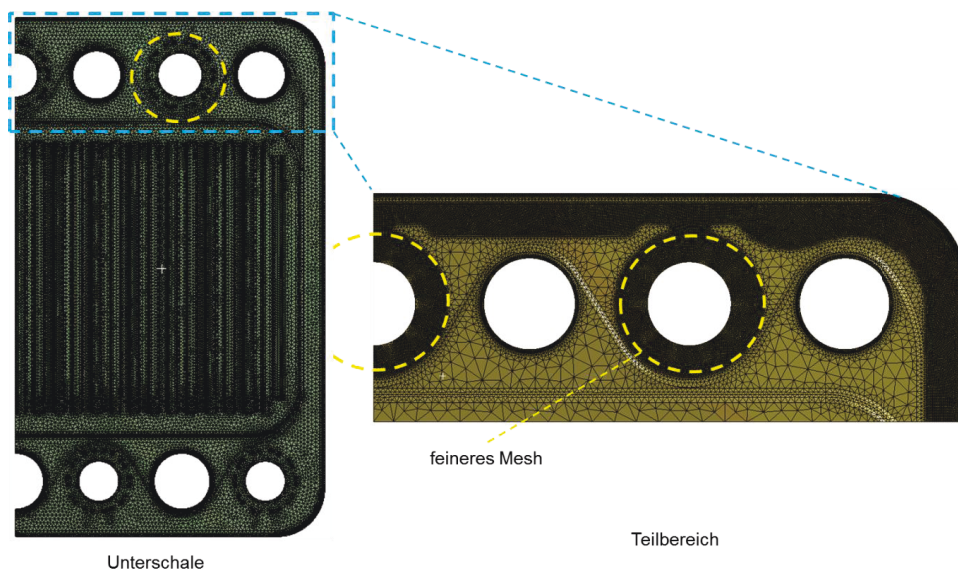


Abbildung 4.40: Teilbereich der Unterschale als Submodell

Die auf das Teilmodell applizierten Verschiebungen sowie die ermittelte Verteilung der Kriechdehnung sind in Abbildung 4.41 dargestellt. Die maximalen Werte der Kriechdehnung liegen, wie erwartet, im Einstromungsbereich der heißen Gase, da in dieser Umgebung die Temperaturen und die Spannungen am höchsten sind. Um die Kriechdehnung zu vermeiden, ist es erforderlich für die gefährdeten Stack-Komponenten ein kriechfestes Material einzusetzen.

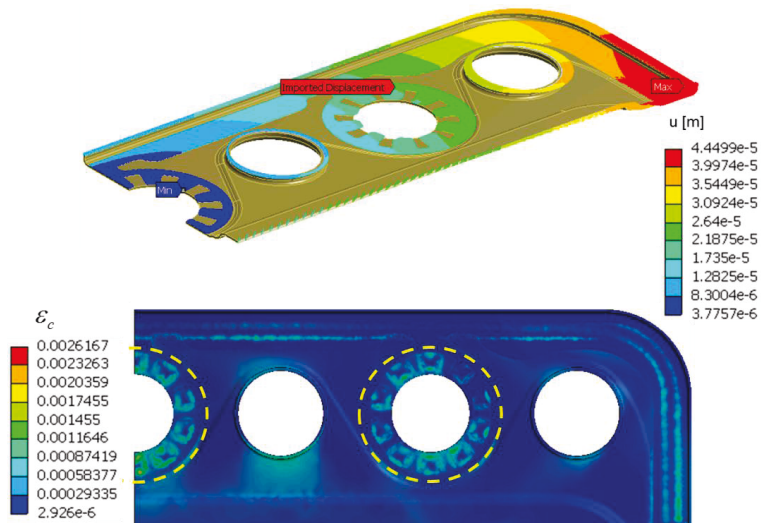


Abbildung 4.41: Übertragene Verschiebungen und berechnete Kriechdehnung im Teilmodell

Das aufgestellte thermomechanische FE-Modell ermöglicht die Vorhersage des Deformationsverhaltens der Stack-Struktur. Mit Hilfe des Modells können die räumlichen Feldgrößen: Spannungstensor, Verzerrungstensor und Verschiebungsvektor in den Stack-Komponenten unter verschiedenen Randbedingungen ermittelt werden, die dem realen Prozess entsprechen. Die Mesh-Unabhängigkeit des Modells und dessen Konvergenzverhalten wurden überprüft. Das aufgestellte Berechnungsmodell dient als Werkzeug zur Überprüfung der Tragfähigkeit und der Gebrauchstauglichkeit der einzelnen Komponenten des betrachteten SOFC-Stacks, um seine Funktionalität zu gewährleisten.

Um das reale Materialverhalten der Stack-Elemente zu beschreiben, berücksichtigen die implementierten temperaturabhängigen Materialmodelle das elastische sowie das elastisch-plastische und viskose mechanische Verhalten der verwendeten Materialien.

Die Modellvalidierung auf Basis der experimentellen Daten bestätigt die ermittelten Simulationsergebnisse und zeigt, dass der Verbund in der Umgebung des Einströmungsbereichs der heißen Gase infolge der Beanspruchung möglicherweise gefährdet ist. Dies stimmt mit den Ergebnissen der fluiddynamischen Analyse im vorigen Kapitel sehr gut überein, da in diesem Bereich hohe Temperaturgradienten zu beobachten sind.

Die maximalen Spannungen in der Zelle treten im Lasteinleitungsbereich, wo die Zelle mit der Oberschale verbunden ist. Daher ist an dieser Stelle eine Schweißverbindung aufgrund ihrer höheren Festigkeit gut geeignet, insbesondere bei der eingesetzten metallgestützten Zelle.

Ferner wurde die Submodeling-Technik eingesetzt, um mit Hilfe eines feineren Rechnetzes Teile des Modells und der Komponenten, in denen hohe lokale Spannungen auftreten, genauer zu untersuchen.

Das aufgestellte FE-Modell ermöglicht die Durchführung detaillierter Simulationsberechnungen und Parameterstudien, um die Auswirkungen verschiedener Einflussparameter auf die auftretenden Spannungen zu untersuchen. Insbesondere die Variation der Materialkombinationen und der Struktursteifigkeit haben großen Einfluss auf die im Stack hervorgerufenen Spannungen. Weitere Einflussparameter stellen die thermische Belastung und die mechanischen Randbedingungen dar. Auf den Einsatz der aufgestellten Modelle für Simulationsberechnungen und Parameterstudien wird im nächsten Kapitel eingegangen.

Möglichkeiten zur Reduzierung der hervorgerufenen Spannungen sind ein Ziel der Optimierungsanalyse, für die das Berechnungsmodell sehr gut geeignet ist. Dies wird im Kapitel 7 näher betrachtet.

5 Modelleinsatz für Parameterstudien

5.1 Variation der Lastbedingungen und Materialkombinationen

Die aufgestellten numerischen fluiddynamischen und strukturmechanischen Modelle werden für die Simulationsberechnungen in einer Parameterstudie eingesetzt, um die Auswirkungen der Variation von Materialeigenschaften sowie Last- und Randbedingungen zu untersuchen. Dabei werden die Randbedingungen so variiert, dass der Stack sowohl durch gleichmäßig verteilte als auch inhomogene thermische Last beansprucht wird. Insgesamt werden die in der Tabelle 5.1 zusammengefassten Fälle untersucht.

Tabelle 5.1: Lastbedingungen der Simulationsberechnung
(Material- und Temperaturgradienten)

Lastfall	Gradient
homogene Temperaturverteilung	$T_{,i} = 0_i, i = 1, 2, 3$
inhomogene Temperaturverteilung	$T_{,i} \neq 0_i, i = 1, 2, 3$
homogenes Material	$\alpha_{,i} = 0_i, i = 1, 2, 3$
inhomogenes Material	$\alpha_{,i} \neq 0_i, i = 1, 2, 3$

Weiterhin wird das thermomechanische Verhalten des Stacks analysiert, wenn der ITM-Stahl mit verschiedenen Glastypen kombiniert wird. Die Werkstoffkombinationen sind in der Tabelle 5.2 zusammengestellt. Beim ITM-Stahl handelt es sich um einen ferritischen Chromstahl der Firma Plansee. Die verschiedenen Typen der Glasfügung, G48, G49 und G87 wurden am Forschungszentrum Jülich für SOFC-Anwendungen entwickelt, wobei die Bezeichnung G49 eine nicht verbreitete Glasfügung charakterisiert.

Tabelle 5.2: Materialkombinationen der Simulationsberechnung

Stahl			Glas		
ITM	G48	G49	G87	G87s*	G87opt**

*G87 mit $\alpha_{Glas} = \alpha_{Stahl}$, **G87 mit optimiertem α_{Glas}

Das Glas G87s bezeichnet eine theoretische Fügung aus einem Glas mit dem Wärmeausdehnungskoeffizienten des ITM-Stahls. Dagegen stellt das Glas G87opt eine optimierte Glasfügung dar, deren Wärmeausdehnungskoeffizient an den des ITM-Stahls so angepasst ist, dass die im Glas hervorgerufenen thermischen Spannungen minimiert sind. Anschließend wird mit der Werkstoffkombination ITM und G87opt das thermomechanische Stack-

Verhalten unter der Auswirkung inhomogener Temperaturverteilung untersucht. Das applizierte Temperaturfeld wird mit Hilfe gekoppelter fluiddynamischer Analyse ermittelt.

Im Folgenden wird der Fall betrachtet, bei dem der Stack unter isothermen Lastbedingungen vom dehnungsfreien Zustand aus (bei 800 °C) bis zur Raumtemperatur abgekühlt und anschließend aufgeheizt wird. Hierbei wird die thermische Last schrittweise appliziert, wie in Abbildung 5.1 dargestellt. Um die Berechnungsdauer zu reduzieren, wird der Aufheizprozess schneller durchgeführt. Daher liegen die Punkte mit den Koordinaten (Lastschritt, Temperatur) nicht spiegelsymmetrisch bezüglich der vertikalen Linie, die durch den Punkt (6,25 °C) verläuft und somit den Abkühlprozess vom Aufheizprozess trennt.

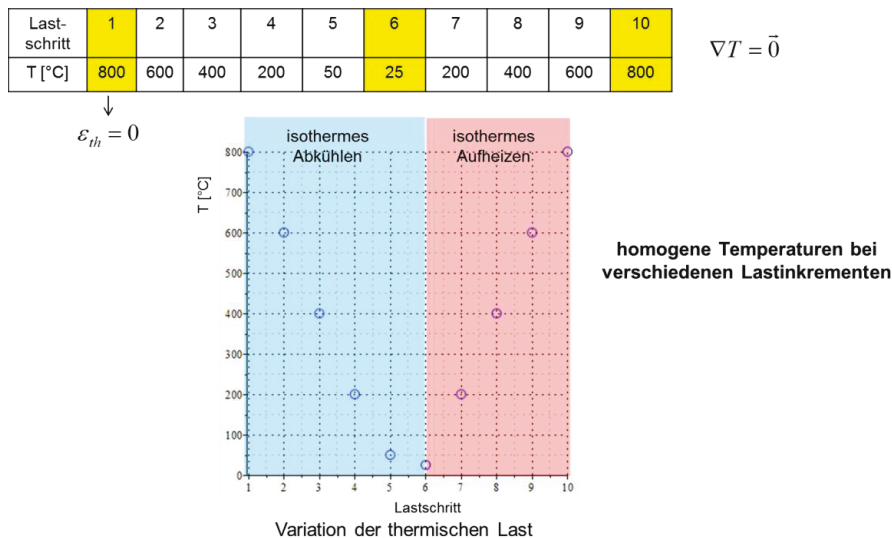


Abbildung 5.1: Variation der Temperatur über den Lastschritt

Unter den betrachteten Bedingungen gilt für den Temperaturgradienten die Beziehung

$$T_{,i} = 0_i \quad (5.1)$$

Da bei dieser Belastungsart kein Temperaturgradient in der Struktur vorliegt, wird der hervorgerufene Spannungszustand hauptsächlich durch den Materialgradienten bewirkt. Somit liefert diese Untersuchung eine Aussage über den Einfluss des Wärmeausdehnungskoeffizienten auf das Spannungsfeld bzw. inwieweit eine Anpassung der thermischen Materialeigenschaften erforderlich ist.

Ferner wird zur Überprüfung der Ergebnisse ein einfaches eindimensionales Verbundmodell vorbereitet, das aus drei Schichten besteht, wie in Abbildung 5.2 gezeigt. Die Stablänge beträgt 40 mm, während die Schichten eine Breite von 2 mm haben. Die Dicken der entsprechenden Stahl- und Glasschichten sind jeweils 0.3 mm bei Stahl und 0.2 mm bei Glas.

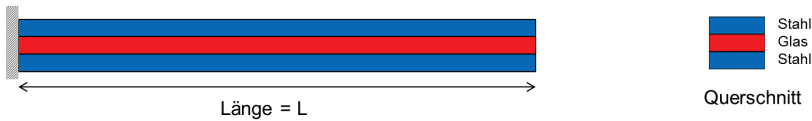


Abbildung 5.2: Verbundstab unter thermischer Last

Der Verbundstab ist am linken Ende eingespannt und steht unter thermischer Last. Unter der Annahme des eindimensionalen Spannungszustandes gelten für die Gesamtdehnungen ε_{Stahl} und ε_{Glas} der einzelnen Schichten des Stabes die Zusammenhänge

$$\varepsilon_{Stahl} = \varepsilon_{Stahl}^e + \varepsilon_{Stahl}^{th} \quad (5.2)$$

und

$$\varepsilon_{Glas} = \varepsilon_{Glas}^e + \varepsilon_{Glas}^{th}, \quad (5.3)$$

die ausdrücken, dass die Gesamtdehnung des jeweiligen Materials aus der Summe des elastischen ε^e und des thermischen ε^{th} Anteils besteht. Unter der Annahme eines linear elastischen Materialverhaltens für beide Werkstoffe gilt das Hook'sche Gesetz gemäß den Gleichungen

$$\begin{aligned} \sigma_{Stahl} &= E_{Stahl} * \varepsilon_{Stahl}^e \\ \sigma_{Glas} &= E_{Glas} * \varepsilon_{Glas}^e \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die thermischen Dehnungen lassen sich gemäß den Beziehungen

$$\begin{aligned} \varepsilon_{Stahl}^{th} &= \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Stahl} * d\vartheta \\ \varepsilon_{Glas}^{th} &= \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Glas} * d\vartheta \end{aligned} \quad (5.5)$$

berechnen, wobei

E_{Stahl} : Elastizitätsmodul des Stahls

E_{Glas} : Elastizitätsmodul des Glases

α'_{Stahl} : Wärmeausdehnungskoeffizient des Stahls

α'_{Glas} : Wärmeausdehnungskoeffizient des Glases

darstellen. In den Gleichungen 5.5 wird die Temperaturabhängigkeit der Wärmeausdehnungskoeffizienten vom Stahl und Glas berücksichtigt, die im Allgemeinen durch eine steigende Funktion beschrieben wird. T und T_{ref} bezeichnen jeweils die lokale Temperatur und die spannungsfreie Referenztemperatur. Als Kompatibilitätsbedingung der Deformation wird

verlangt, dass sowohl Stahl als auch Glas im Interfacebereich die gleiche Verschiebung erfahren, was durch die Beziehung

$$u_{Stahl} = u_{Glas} \quad (5.6)$$

ausgedrückt wird. In dieser Gleichung repräsentieren u_{Stahl} und u_{Glas} jeweils die Verschiebungen am rechten Ende des Stahl- bzw. des Glasstreifens. Die Verschiebungen der Endpunkte der jeweiligen Schichten sind mit den entsprechenden Dehnungen über die kinematischen Zusammenhänge gemäß

$$\begin{aligned} \varepsilon_{Stahl} &= u_{Stahl} / L \\ \varepsilon_{Glas} &= u_{Glas} / L \end{aligned} \quad (5.7)$$

verknüpft. Aus den Gleichungen ergibt sich für die Spannungen in den jeweiligen Komponenten der Zusammenhang

$$\frac{\sigma_{Stahl}}{E_{Stahl}} * L + L * \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Stahl} * d\vartheta = \frac{\sigma_{Glas}}{E_{Glas}} * L + L * \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Glas} * d\vartheta \quad (5.8)$$

bzw.

$$\frac{\sigma_{Stahl}}{E_{Stahl}} + \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Stahl} * d\vartheta = \frac{\sigma_{Glas}}{E_{Glas}} + \int_{T_{ref}}^T \alpha'_{Glas} * d\vartheta \quad (5.9)$$

Weiterhin gilt die statische Gleichgewichtsbedingung

$$A_{Stahl} * \sigma_{Stahl} + A_{Glas} * \sigma_{Glas} = 0, \quad (5.10)$$

wobei A_{Stahl} und A_{Glas} die Querschnittflächen der jeweiligen Materialschichten darstellen. Die mechanischen und thermischen Materialparameter sind Funktionen der Temperatur. Die beiden letzten Gleichungen lassen sich nach den zwei unbekannten Größen σ_{Stahl} und σ_{Glas} auflösen und man erhält die Zusammenhänge

$$\sigma_{Stahl} = E_{Stahl} * \left[\int_{T_{ref}}^T (\alpha'_{Glas} - \alpha'_{Stahl}) * d\vartheta \right] * \frac{1}{\frac{E_{Stahl} * A_{Stahl}}{E_{Glas} * A_{Glas}} + 1} \quad (5.11)$$

und

$$\sigma_{Glas} = -E_{Glas} * \left[\int_{T_{ref}}^T (\alpha'_{Glas} - \alpha'_{Stahl}) * d\vartheta \right] * \frac{1}{\frac{E_{Glas} * A_{Glas}}{E_{Stahl} * A_{Stahl}} + 1} \quad (5.12)$$

Der Integralterm in den Gleichungen 5.11 und 5.12 kann in der Form

$$\int_{T_{ref}}^T (\alpha'_{Glas} - \alpha'_{Stahl}) * d\vartheta = \Delta\alpha * \Delta T \quad (5.13)$$

zusammengefasst werden, wobei $\Delta\alpha$ eine temperaturabhängige Funktion darstellt. Des Weiteren führt man das Verhältnis der Dehnsteifigkeiten gemäß

$$C = \frac{E_{Stahl} * A_{Stahl}}{E_{Glas} * A_{Glas}} \quad (5.14)$$

ein, so erhalten die Gleichungen (5.11) und (5.12) jeweils die komprimierte Form

$$\sigma_{Stahl} = E_{Stahl} * \Delta\alpha * \Delta T * \frac{1}{C + 1} \quad (5.15)$$

bzw.

$$\sigma_{Glas} = -E_{Glas} * \Delta\alpha * \Delta T * \frac{1}{\frac{1}{C} + 1}, \quad (5.16)$$

wobei $\Delta\alpha$ den temperaturabhängigen Unterschied des Wärmeausdehnungskoeffizienten beider Materialien bezeichnet. Die beiden letzten Gleichungen zeigen deutlich, wie sich die Unterschiede in den physikalischen Materialeigenschaften auf die im Stab verursachten Spannungen auswirken. Das thermomechanische Verhalten des Verbundstabs wird sowohl durch die Wärmeausdehnungskoeffizienten als auch durch die Struktursteifigkeit seiner Bestandteile charakterisiert. Die Steifigkeit der Struktur wird durch das Spannungs-Dehnungs-Verhalten der eingesetzten Materialien sowie durch die Geometrie beschrieben. Unter der Annahme eines eindimensionalen Spannungszustandes wird die Geometrie im vorliegenden Fall durch die Querschnittsfläche und die Stablänge definiert. Der Deformationsvorgang unter der Einwirkung von thermischen Lasten lässt sich durch die Vorstellung veranschaulichen, dass sich die verschiedenen Stabbereiche unabhängig voneinander zunächst bedingt durch deren Wärmeausdehnungskoeffizienten sowie den Temperaturunterschied relativ zum spannungsfreien Zustand verformen. Dies führt in den verschiedenen Bereichen zu unterschiedlichen Dehnungen. Beschränkt durch die Verträglichkeitsbedingung müssen die Stabbereiche zusammenbleiben. Um diese Bedingung zu erfüllen, muss im Interfacebereich ein Kompromiss der Deformationen gefunden werden, bei dem der steifere Strukturbereich dominiert. Dies führt dazu, dass die Bereiche mit höherer Neigung zur Formänderung gehindert und die weniger dehnungsfähigen Bereiche mitgezogen werden, was schließlich zu thermischen Spannungen führt.

Ferner zeigen die Gleichungen, dass bei der Abwesenheit mechanischer Lasten und Auflagerungen, die eine Behinderung der thermischen Dehnungen darstellen, für den Grenzfall gleicher Wärmeausdehnungskoeffizienten die Spannungen im Stab verschwinden.

$$(\alpha_{Glas} - \alpha_{Stahl}) \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \sigma_{Stahl,Glas} \rightarrow 0 \quad (5.17)$$

Dieses Verhalten verdeutlicht die Tatsache, dass angepasste Wärmeausdehnungskoeffizienten der verwendeten Materialien zur Reduzierung der auftretenden Spannungen führen.

Das einfache eindimensionale Verbundstab-Modell wird im Folgenden herangezogen, um die Plausibilität der Simulationsberechnungen beim 3D Stack-Modell zu überprüfen. Zunächst wird der Grenzfall betrachtet, bei dem der Stahl und das Glas den gleichen Wärmeausdehnungskoeffizienten besitzen. Unter den in Abbildung 5.1 gegebenen Lastbedingungen wird der ITM-Stahl mit dem Glastypen G87s untersucht, wobei die Bedingungen

$$\begin{aligned} \alpha_{Glas} &= \alpha_{Stahl} = \alpha \\ \Leftrightarrow \alpha_i &= 0_i \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (5.18)$$

erfüllt sind. Gleichung (5.18) stellt die Bedingung für den Materialgradienten α_i dar, der aufgrund gleicher Materialparameter verschwinden muss. Anders als im eindimensionalen Fall können im Stack bei gleichen Wärmeausdehnungskoeffizienten Spannungen auftreten, da infolge der mechanischen Last und der Stack-Auflagerung die thermische Verformung der Struktur verhindert wird, weshalb schließlich Spannungen verursacht werden. In Abbildung 5.3 sind die Verläufe der lokal ermittelten maximalen Spannungen $\max(\sigma(x_1, x_2, x_3))$ im Stahl und im Glas über die Temperatur dargestellt.

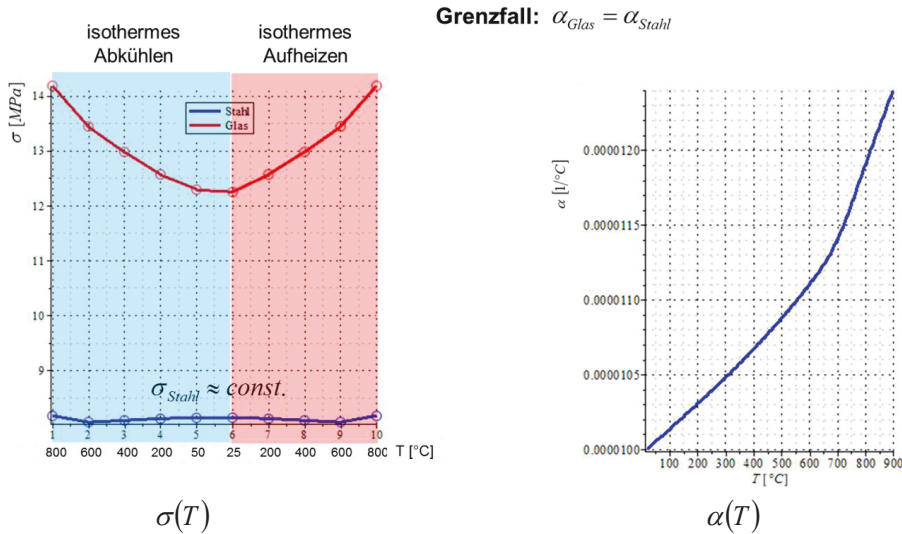


Abbildung 5.3: Verläufe von σ und α über die Temperatur für den Grenzfall $\alpha_{Glas} = \alpha_{Stahl}$

Im Gegensatz zum eindimensionalen Verbundstab, bei dem eine Komponente des Spannungstensors existiert, wird im Stack ein dreidimensionaler Spannungszustand mit räumlicher Verteilung hervorgerufen, wie im Allgemeinen im vorigen Kapitel erläutert wurde. Ferner unterscheiden sich die maximalen Spannungen im Stahl und im Glas aufgrund ihrer unterschiedlichen Steifigkeiten, die auch von der lokalen Temperatur abhängen. Das Ergebnis zeigt, welchen Einfluss die Anpassung der Deformationen verschiedener Bereiche einer inhomogenen Struktur hat. Daher wird angestrebt, dass bei den eingesetzten Werkstoffen möglichst verträgliche physikalische Eigenschaften existieren. Dies bedeutet, dass möglichst geringe Unterschiede in den Wärmeausdehnungskoeffizienten vorliegen. Ferner wird dies als Ziel der Materialoptimierung in einer nachkommenden Untersuchung angesehen. Im Folgenden werden die Werkstoffkombinationen ITM-Stahl und die Glastypen G87 und G49 be-

trachtet. Die Verläufe der örtlich maximalen Spannung über die thermische Last sind in den Abbildungen 5.4 und 5.5 dargestellt. Bei diesen Werkstoffkombinationen liegt ein relativ großer Unterschied der Wärmeausdehnungskoeffizienten beider Materialien vor. Die maximalen Spannungen sowohl im Stahl als auch im Glas treten bei Raumtemperatur auf. Dabei handelt es sich um einen dreidimensionalen Spannungszustand mit räumlicher Abhängigkeit. Die Zugspannungen im Glas können an einem Ort auftreten, wie in Abbildung 4.25 gezeigt wurde, und verursachen lokale Risse, die infolge thermozyklischer Belastung zum Ermüdungsbruch führen können.

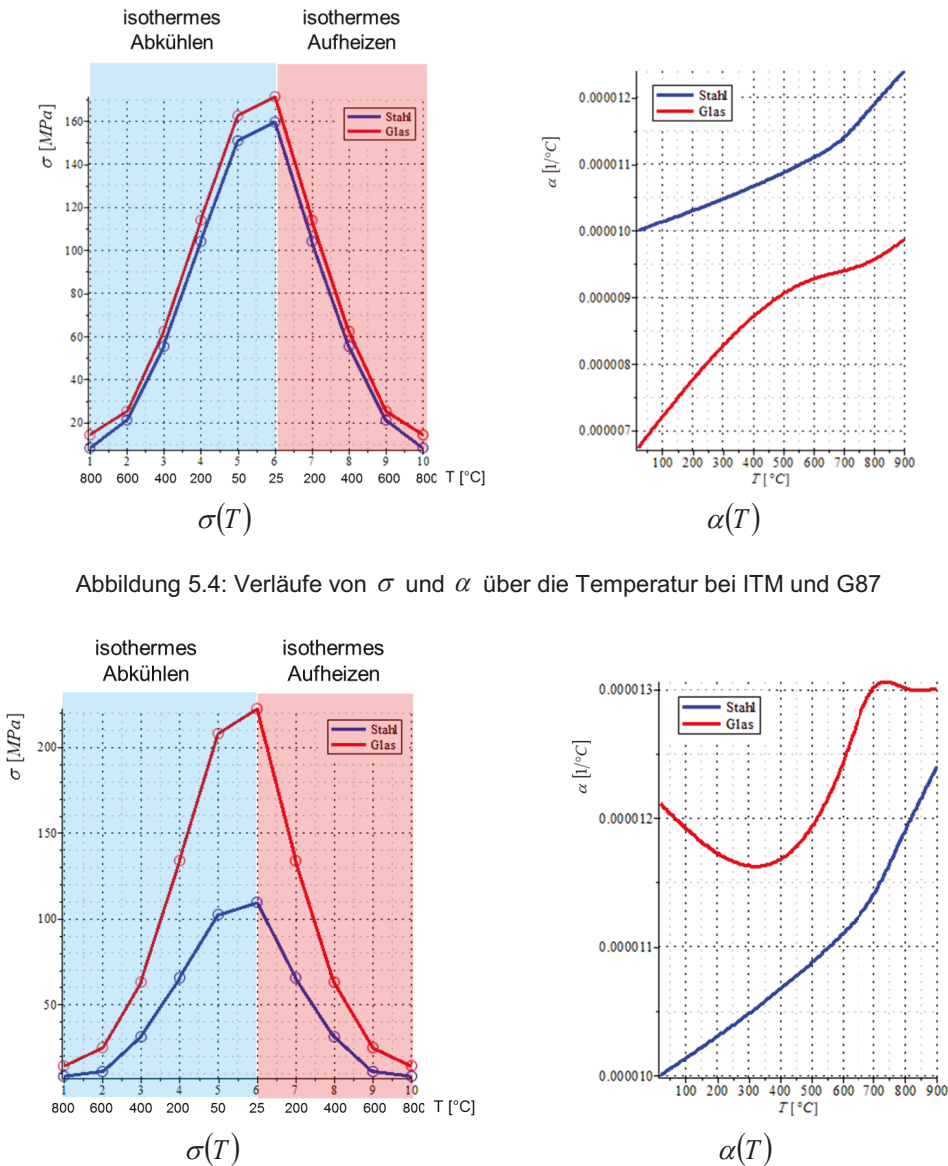


Abbildung 5.4: Verläufe von σ und α über die Temperatur bei ITM und G87

Abbildung 5.5: Verläufe von σ und α über die Temperatur bei ITM und G49

Als weiteres Beispiel wird im Vergleich hierzu der Fall betrachtet, in dem der ITM-Stahl mit dem Glas G48 kombiniert wird. Der Verlauf der maximalen Spannung über die thermische Last ist in Abbildung 5.6 gezeigt.

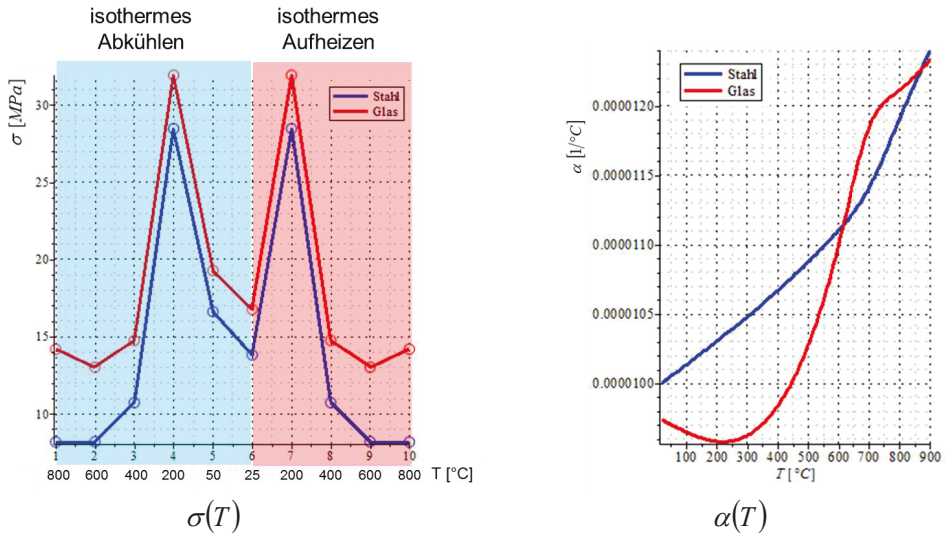


Abbildung 5.6: Verläufe von σ und α über die Temperatur bei ITM und G48

Auffällig ist in diesem Fall, dass die Spannungsmaxima nicht dort auftreten, wo ΔT am größten ist. Zur Erläuterung wird das Verhalten des eindimensionalen Verbundstabs unter den gleichen isothermen Aufheizbedingungen analysiert. Die entsprechenden Verläufe des Terms $\Delta\alpha * \Delta T$ über die Temperatur sind in Abbildung 5.7 zusehen.

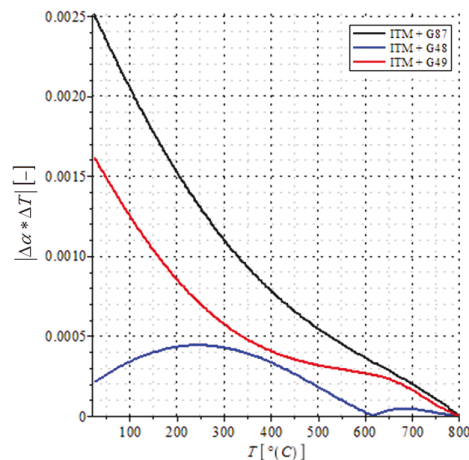


Abbildung 5.7: Verläufe des Betrags $|\Delta\alpha * \Delta T|$ über die Temperatur für ITM-Stahl mit verschiedenen Glastypen

Die Kurven zeigen ein ähnliches Verhalten wie die maximalen Spannungen, wobei die höchsten Spannungen nicht immer bei Raumtemperatur auftreten, sondern im Bereich wo der Betrag $|\Delta\alpha * \Delta T|$ ein Maximum hat. Die Analyse lässt den Einfluss der physikalischen Materialeigenschaften auf die hervorgerufenen Spannungen in einem inhomogenen Körper deutlich erkennen. Aus diesem Grund erfordert die Reduzierung der Spannungen im Stack, der aus verschiedenen Materialien besteht, die Anpassung der thermomechanischen Parameter der verwendeten Werkstoffe.

5.2 Materialoptimierung

Der Wärmeausdehnungskoeffizient ist ein wichtiger Einflussfaktor beim Zusammenfügen von Komponenten aus verschiedenen Werkstoffen, die hohen Betriebstemperaturen und zyklischen Lasten unterworfen sind. Nicht angepasste Wärmeausdehnungskoeffizienten benachbarter Komponenten führen zu Zugspannungen in einem Material und zu Druckspannungen im anderen. In der betrachteten Analyse werden zwecks der Abdichtung Stahlkomponenten mit Hilfe von Glaskeramik zusammengefügt. Unter Zugbeanspruchung sind die spröden glaskeramischen Komponenten der Gefahr der Rissbildung ausgesetzt, was zum Versagen der Abdichtung führen kann.

Die vorgestellten Simulationsberechnungen zeigen, welchen Einfluss die Variation der physikalischen Materialeigenschaften auf das Spannungsverhalten des Stacks hat. Weiterhin wird daraus deutlich, dass zur Reduzierung der auftretenden Spannungen eine Anpassung der Wärmeausdehnungskoeffizienten der eingesetzten Werkstoffe erforderlich ist. Aufgrund des komplexen Spannungszustandes ist es erforderlich, die Optimierungstechnik einzusetzen, um dieses Ziel zu erreichen. Im Folgenden wird eine Optimierungsanalyse durchgeführt, mit deren Hilfe die Verträglichkeit der auftretenden Deformationen verbessert wird, was schließlich zur Verringerung der auftretenden Spannungen führt. Dabei wird die Werkstoffkombination ITM-Stahl mit der Glasfügung G87 als Ausgangsstruktur betrachtet. Für einen angepassten Wärmeausdehnungskoeffizienten wird der Optimierungsansatz gemäß

$$\alpha_{opt}(T) = \delta + \varphi * \alpha_{G87}(T) \quad (5.19)$$

aufgestellt. Als Zielfunktion wird die maximal im Glas auftretende Zugspannung σ_G gebildet

$$f = \sigma_G, \quad f > 0 \quad (5.20)$$

Die Optimierungsaufgabe besteht darin, die Parameter δ und φ des mathematischen Modells in Gleichung (5.19) so zu ermitteln, dass die Funktion f ein Minimum hat. Die Optimierungsaufgabe wird iterativ gelöst, wie in Abbildung 5.8 erläutert, wobei als Lösung die Werte der gesuchten Parameter ermittelt werden.

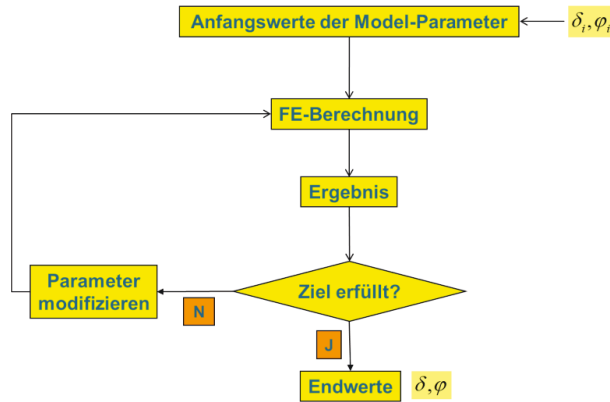


Abbildung 5.8: Iterations-Schleife zur Materialoptimierung

Im betrachteten Fall ergeben sich die Werte

$$\begin{aligned}\delta &= 3,4e - 6 \text{ K}^{-1} \\ \varphi &= 0,9225\end{aligned}\tag{5.21}$$

Die Verläufe der Wärmeausdehnungskoeffizienten des ITM-Stahls, des Glases G87 und des optimierten Glases G87opt sind in Abbildung 5.9 als Funktionen der Temperatur dargestellt.

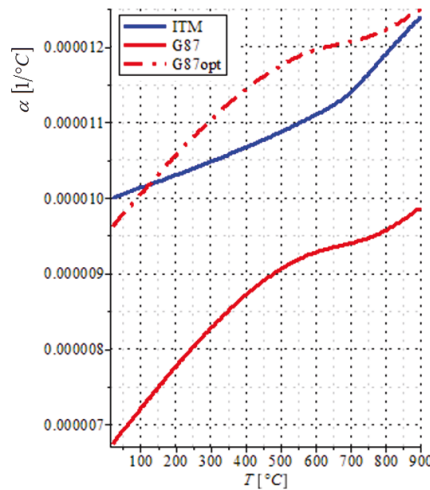


Abbildung 5.9: Temperaturabhängigkeit der Wärmeausdehnungskoeffizienten

Mit dem angepassten Glas G87opt wird zur Überprüfung des Modells eine isotherme Abkühlung des Stacks vom dehnungsfreien Zustand bei 800 °C bis zur Raumtemperatur durchgeführt. Der Verlauf der thermischen Last ist in Abbildung 5.10 dargestellt.

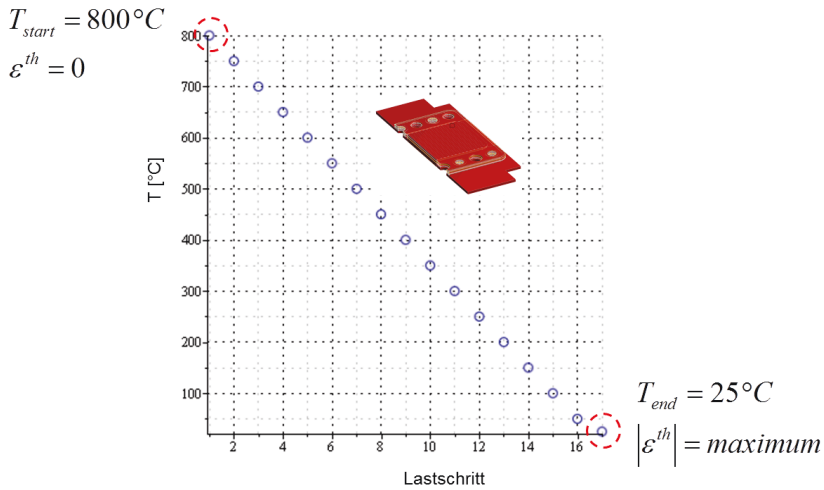


Abbildung 5.10: Verlauf der Temperatur über den Lastschritt

Die Verteilung der thermischen Dehnung im Stahl- und Glaskörper am Ende der Abkühlung bei 25°C sowie der Verlauf der thermischen Dehnung über der thermischen Last in beiden Materialien sind in Abbildung 5.11 dargestellt.

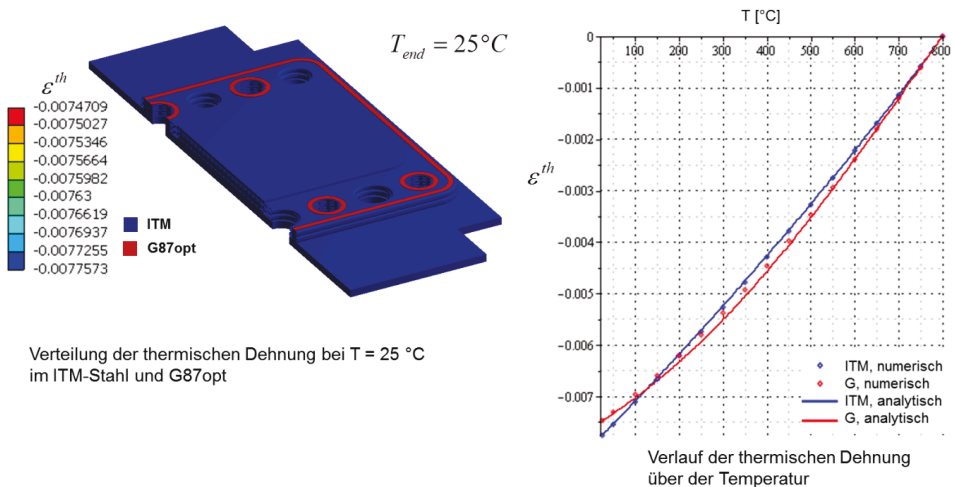


Abbildung 5.11: Thermische Dehnung, räumliche Verteilung und Temperaturabhängigkeit

Zur Ermittlung der thermischen Dehnung wird ein linearer Zusammenhang der Form

$$d\varepsilon^{th} = \alpha(T) * dT \quad (5.22)$$

angenommen, der die thermische Dehnung als Funktion der Temperatur T und des Wärmeausdehnungskoeffizienten α darstellt. Die Integration der Gleichung (5.22) über den betrachteten Temperaturbereich unter Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit von α liefert

$$\varepsilon^{th} = \int_{T_{ref}}^T \alpha(\vartheta) * d\vartheta \quad (5.23)$$

Das Ergebnis zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der FE-Simulation und der analytischen Berechnung der thermischen Dehnungen nach Gleichung (5.23) in den beiden Werkstoffen. Weiterhin ist in der Abbildung 5.11 ersichtlich, dass eine geringe Abweichung in der thermischen Dehnung von Stahl und Glas vorliegt. Nach Überprüfung der thermischen Dehnung wurde das Stack-Verhalten unter einem isothermen Lastzyklus gemäß Abbildung 5.1 untersucht. Der Verlauf der maximalen Spannung über die Lastinkremente ist in Abbildung 5.12 zu sehen.

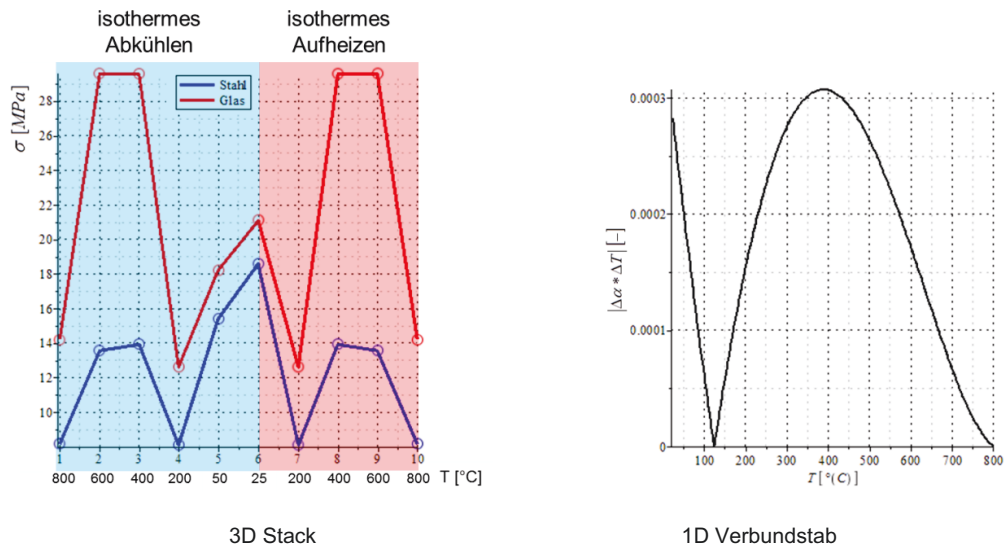


Abbildung 5.12: Verläufe von σ und $|\Delta\alpha * \Delta T|$ über die Temperatur für ITM und G87opt

Zum Vergleich wird weiterhin das Verhalten des Composite-Stabs unter isothermem Aufheizen herangezogen, wie im rechten Teil der Abbildung 5.12 dargestellt. In beiden Modellen ist zu erkennen, dass die Spannungsmaxima bei Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur vorliegen und wo der Betrag $|\Delta\alpha * \Delta T|$ ein lokales Maximum hat, was die Plausibilität des dreidimensionalen FE-Stack-Modells aufzeigt. In Abbildung 5.13 ist ein Bereich im Glaskörper gezeigt, wo die höchsten Werte der Spannung auftreten. Dabei ist zu beachten, dass aufgrund der komplexen Geometrie des betrachteten Stacks mehrere verteilte Stellen mit Spannungsmaxima existieren können.

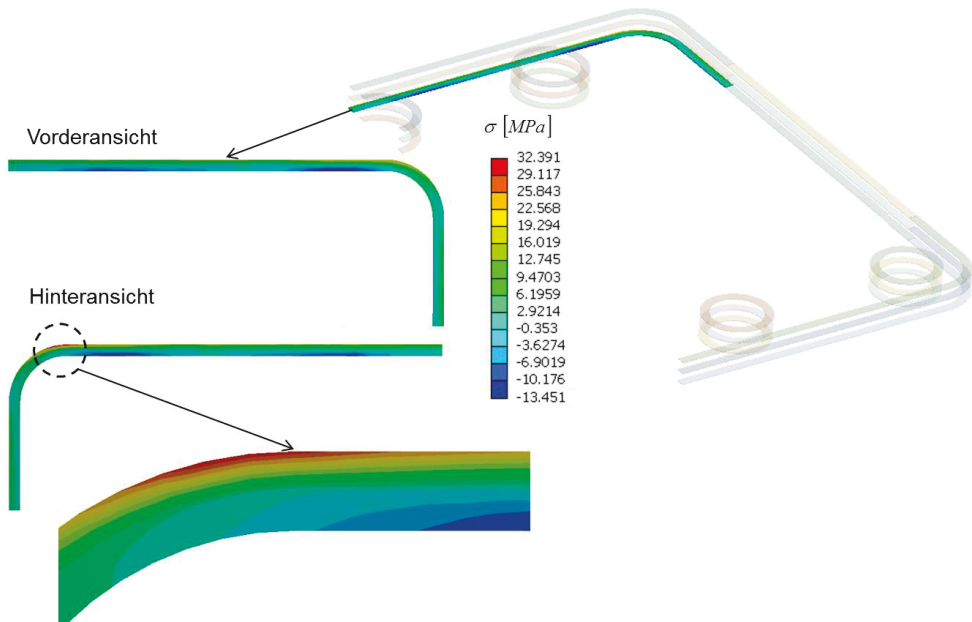


Abbildung 5.13: Räumliche Verteilung der Spannung in der Glasfügung mit G87opt

Zusammengefasst sind in Abbildung 5.14 die ermittelten Maximalwerte der Spannung bei der Kombination des ITM-Stahls mit verschiedenen Glasstypen. Dabei bezeichnen G87s bzw. G87opt jeweils Glas G87 mit dem Wärmeausdehnungskoeffizienten des ITM-Stahls bzw. das mit Hilfe der Optimierungsanalyse angepasste Glas G87. Ferner ist noch zu bemerken, dass die Unterschiede in den auftretenden maximalen Spannungen auf die verschiedenen physikalischen Eigenschaften der eingesetzten Glasstypen zurückzuführen sind, da in den betrachteten Fällen keine Temperaturgradienten vorhanden sind und sich die Randbedingungen nicht ändern. Auffällig ist das thermomechanische Stack-Verhalten bei der Materialkombination ITM-Stahl mit Glas G49, da die Spannung im Glas am höchsten ist und sich von der Spannung im Stahl am meisten unterscheidet. Dieses Verhalten liegt daran, dass das Glas G49 über den ganzen Temperaturbereich einen größeren Wärmeausdehnungskoeffizienten besitzt als der Stahl und folglich mehr zusammenschrumpft. Diese Deformation der Glasfügung wird durch den steiferen Stahl verhindert, weshalb im Glas höhere Zugspannungen hervorgerufen werden. Der Einsatz von Werkstoffkombinationen mit angepassten thermischen Eigenschaften führt zur Reduzierung der hervorgerufenen Spannungen und verbessert somit das thermomechanische Verhalten der Struktur. In den bisher durchgeführten Analysen wird der Stack durch ein homogenes Temperaturfeld belastet. Die in der Realität auftretende ungleichmäßige Temperaturverteilung stellt einen weiteren Einflussfaktor auf die Größe der hervorgerufenen Spannungen dar. Die Auswirkungen des Temperaturgradienten auf das Spannungsfeld werden anhand eines Beispiels im folgenden Abschnitt näher betrachtet, indem der Stack einer inhomogenen thermischen Last ausgesetzt wird.

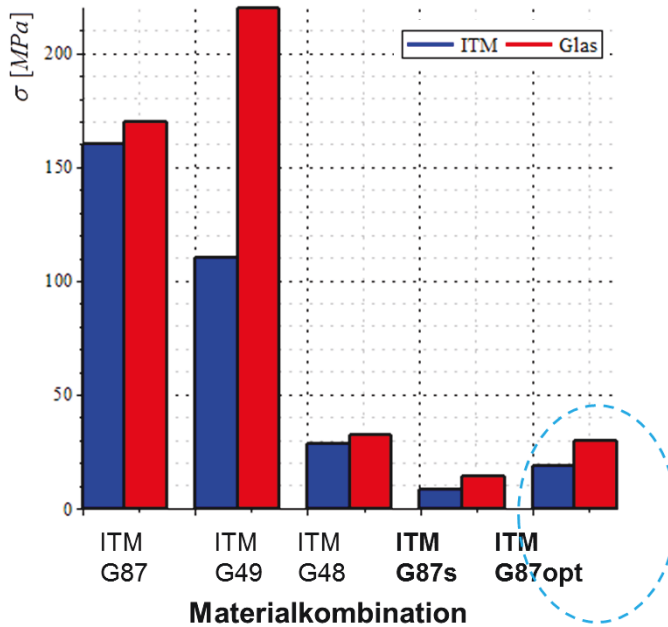


Abbildung 5.14: Maximale Spannung in den untersuchten Materialkombinationen

5.3 Einfluss des Temperaturgradienten auf die Spannung

Die Auswirkungen der Inhomogenität der Temperaturverteilung auf die verursachten Spannungen lassen sich erklären, wenn man die Gleichungen (5.22) und (5.23) betrachtet. Entsprechend den Temperaturen und dem Wärmeausdehnungskoeffizienten sind die thermischen Verformungen ortsabhängig. Dies bewirkt, dass die Bewegung von Bereichen mit großer Neigung zur Deformation durch Zonen mit niedriger Verformungsbereitschaft verhindert wird. Dies wiederum führt zu einer zusätzlichen Beanspruchung, die folglich höhere Spannungen verursacht. Anhand des mathematischen Modells lässt sich der Einfluss des Temperaturgradienten verdeutlichen, wenn man das thermoelastische Materialmodell in Gleichung (5.24)

$$\sigma_{ji} = E_{jkl}(\epsilon_{kl} - \alpha \Delta T \delta_{kl}) = E_{jkl} \epsilon_{kl} - E_{jkl} \alpha \Delta T \delta_{kl} \quad (5.24)$$

zunächst in der Form

$$\sigma_{ji} = \sigma'_{ji} - E_{jkl} \alpha \Delta T \delta_{kl} \quad (5.25)$$

schreibt. In der letzten Gleichung wurde der Spannungstensor σ'_{kl} eingeführt, für den der Zusammenhang

$$\sigma'_{ji} = E_{jkl} \epsilon_{kl}, \quad (5.26)$$

gilt, der dem Hooke'schen Gesetz eines isothermen Spannungszustands entspricht.

Dies wird deutlich, wenn man die Divergenz des Spannungstensors betrachtet, welche die Form

$$\sigma_{ji,j} = \sigma'_{ji,j} - (E_{jkl} \alpha \Delta T \delta_{kl})_{,j} \quad (5.27)$$

annimmt. Beim isothermen Spannungszustand verschwindet der letzte Term in Gleichung (5.27), da

$$(\Delta T)_{,j} = T_{,j} = 0_j \quad (5.28)$$

gilt. Zur Betrachtung des allgemeinen Falls, in dem die räumliche Temperaturverteilung ungleichmäßig ist und somit ein Temperaturgradient existiert, setzt man Gleichung (5.27) in die Gleichgewichtsbedingung gemäß Gleichung (4.8) ein. Dadurch ergibt sich die Beziehung

$$\sigma'_{ji,j} - (E_{jkl} \alpha \Delta T \delta_{kl})_{,j} = 0_i, \quad (5.29)$$

die sich auch in der Form

$$\sigma'_{ji,j} - E_{jkl} \alpha T_{,j} \delta_{kl} = 0_i \quad (5.30)$$

schreiben lässt. In der letzten Gleichung taucht der Temperaturgradient $T_{,j}$ explizit auf, wodurch seine Verknüpfung mit der Divergenz des Spannungstensors deutlich wird. Des Weiteren besitzt der zweite Term auf der linken Seite der Gleichung (5.30) die Gestalt einer Volumenkraft, die an jedem Punkt des betrachteten Kontinuums angreift. Aus der Herleitung lässt sich erkennen, dass der Spannungszustand in Gleichung (5.30) als eine Überlagerung zweier Lastfälle aufgefasst werden kann:

- isothermer Spannungszustand σ'_{ji} mit einer Volumenkraft $(-E_{jkl} \alpha T_{,j} \delta_{kl})$ aufgrund des Temperaturgradienten $T_{,j}$
- Oberflächenlast $(-E_{jkl} \alpha \Delta T \delta_{kl})$ infolge der Temperaturänderung ΔT

Diese Betrachtungen werden im Folgenden mit Hilfe einer Simulationsberechnung verdeutlicht. Um die Auswirkungen des Temperaturgradienten auf das Spannungsniveau im Stack genauer zu untersuchen, wird als Werkstoffkombination ITM-Stahl mit dem angepassten Glas G87opt ausgewählt. Zum Vergleich wird das Stack-Verhalten zunächst unter isothermer Temperaturlast schrittweise vom spannungsfreien Zustand bei 800 °C auf Raumtemperatur abgekühlt und anschließend im ersten Fall auf gleichmäßige Temperaturen von 200 °C, 400 °C und schließlich 600 °C aufgeheizt. Dagegen wird der Stack im zweiten Fall vom Raumtemperatur-Zustand aus einer inhomogenen Temperaturlast ausgesetzt, bei der die Temperaturverteilung aus einer numerischen fluiddynamischen Berechnung ermittelt wurde. Die auftretenden Temperaturen im Stack liegen im Bereich zwischen 438 °C und 588 °C, wobei die niedrigste Glastemperatur 459 °C beträgt, wie Abbildung 5.15 zeigt. Während der Temperaturgradient bei dem isothermen Aufheizen aufgrund homogener Temperaturverteilung die Gleichung

$$T_{,j} = 0_i \quad (5.31)$$

erfüllt, gilt für diese Feldfunktion beim ungleichmäßigen Temperaturprofil die Beziehung

$$T_i \neq 0_i \quad (5.32)$$

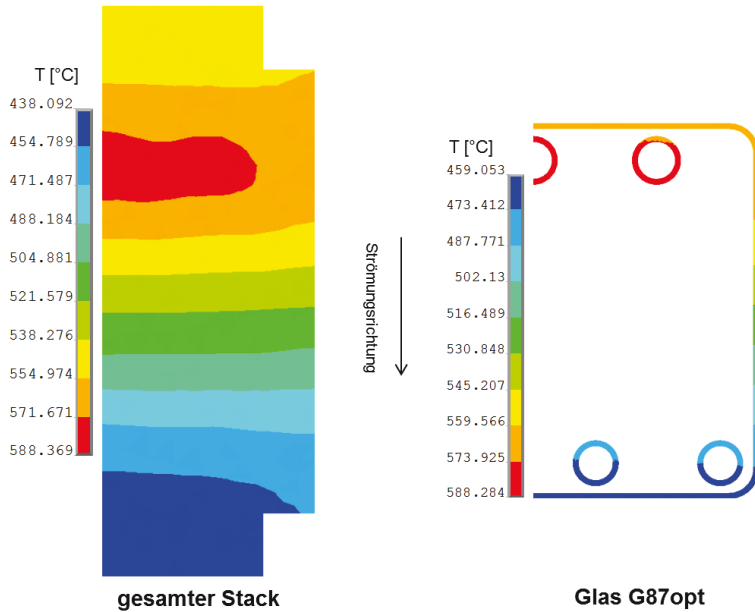


Abbildung 5.15: Temperaturverteilung im Stack und in der Glasfügung

Die thermischen Spannungen, die durch die Existenz der Temperaturgradienten in Festkörper hervorgerufen werden, sind von der Differenz zwischen höchster T_{max} und niedrigster T_{min} im Körper auftretender Temperatur abhängig.

$$|\sigma| \propto |E(T) * \Delta\alpha(T) * (T_{max} - T_{min})| \quad (5.33)$$

Die ermittelten Höchstwerte der Spannung in den betrachteten Lastschritten im Glaskörper für die beiden Fälle sind in Abbildung 5.16 dargestellt.

Der Vergleich der maximalen Werte der Spannung zeigt deutlich, dass bei inhomogener Aufheizung aufgrund des Temperaturgradienten wesentlich höhere Spannungen im Glas hervorgerufen werden. Während bei dem gleichmäßigen Temperaturfeld die Spannungen hauptsächlich infolge der unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten von Stahl und Glas verursacht werden und die maximalen Werte von 29,6 MPa erreichen, liegen bei inhomogener Temperaturverteilung die Spannungswerte bei 75,8 MPa. In diesem Fall überlagern sich die Effekte der verschiedenen temperaturabhängigen Materialeigenschaften und der Temperaturdifferenzen, wie die beiden Gleichungen (5.34) und (5.35) verdeutlichen.

$$|\sigma_{Stahl}| \propto |E_{Stahl}(T) * \Delta\alpha(T) * \Delta T| \quad (5.34)$$

$$|\sigma_{Glas}| \propto |E_{Glas}(T) * \Delta\alpha(T) * \Delta T| \quad (5.35)$$

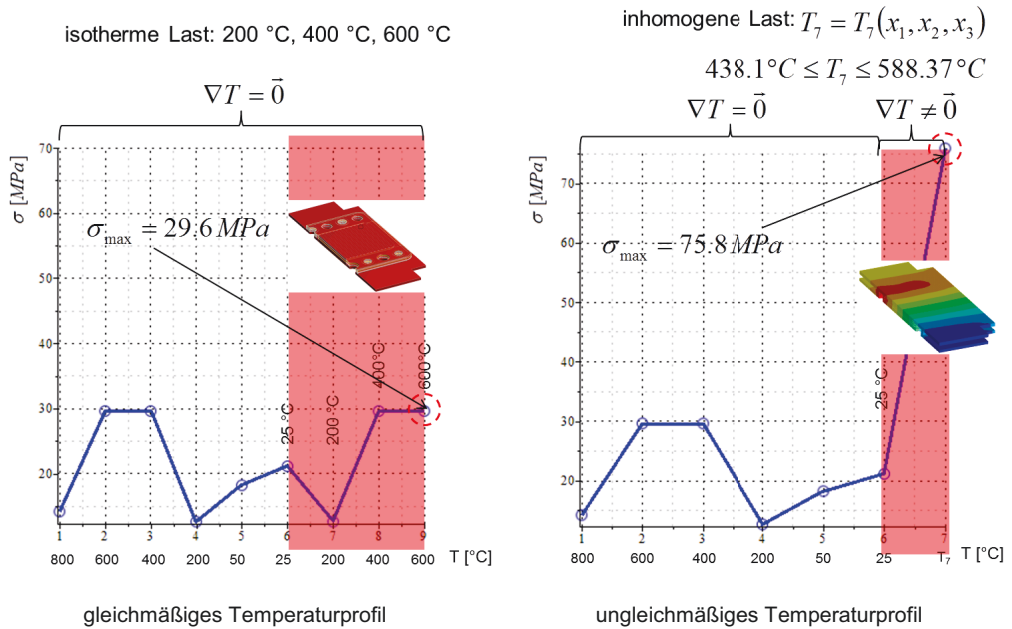


Abbildung 5.16: Verlauf der Spannung im Glas über die thermische Last bei räumlich gleichmäßiger und ungleichmäßiger Temperaturverteilung

An dieser Stelle sei weiterhin zu bemerken, dass die absolut höchsten Werte der Spannungen im 3D Körper nicht nur vom Temperaturgradienten abhängen. Zusätzliche Effekte, wie mechanische Auflagerreaktionen oder Lasten und Inhomogenität der thermomechanischen Materialeigenschaften, müssen berücksichtigt werden. Die Existenz des Temperaturgradienten führt zu einem komplexen Deformationsverhalten der Struktur. Aufgrund der Temperaturabhängigkeit der physikalischen Materialeigenschaften verursacht die Ungleichmäßigkeit der Temperaturverteilung einen vergleichbaren Effekt wie eine zusätzliche Materialinhomogenität. Daher werden im Allgemeinen zwecks Reduzierung der hervorgerufenen Spannungen in der Struktur eine gleichmäßige Temperaturverteilung und angepasste physikalische Materialeigenschaften der Strukturkomponenten angestrebt.

Das aufgestellte FE-Modell ermöglicht die Durchführung detaillierter Simulationsberechnungen und Parameterstudien, um die Auswirkungen verschiedener Einflussparameter auf die auftretenden Spannungen zu untersuchen. Insbesondere die Auswirkungen nicht angepasster Wärmeausdehnungskoeffizienten der einzelnen Stack-Elemente wurden gezeigt, indem der Stack unter den gleichen Auflagerungsbedingungen durch ein gleichmäßiges Temperaturfeld belastet wurde. Dadurch können Effekte des Temperaturgradienten ausgeschlossen werden. Ferner wurde die Variation der Materialkombinationen auf die im Stack hervorgerufenen Spannungen untersucht. Weitere Einflussparameter stellen die thermische Belastung und die mechanischen Randbedingungen dar. Basierend auf den Ergebnissen dieses Kapitels werden im folgenden Kapitel das fluiddynamischen und das thermomechanische Stack-Verhalten während eines Prozesszyklus untersucht.

6 Multiphysikalische Simulation eines Prozesszyklus

6.1 Einführung

Nach der Aufstellung und Validierung der Simulationsmodelle wurden diese zur Materialoptimierung zwecks Anpassung der Wärmeausdehnungskoeffizienten der verwendeten Werkstoffe eingesetzt. Ziel der Analyse ist es, die im Brennstoffzellen-Stack auftretenden Spannungen zu reduzieren. Als nächster Schritt werden im Folgenden das fluiddynamische und thermomechanische Stack-Verhalten während eines Operationszyklus betrachtet. Ein solcher Prozess durchläuft die in Abbildung 6.1 zusammengefassten Prozessphasen.

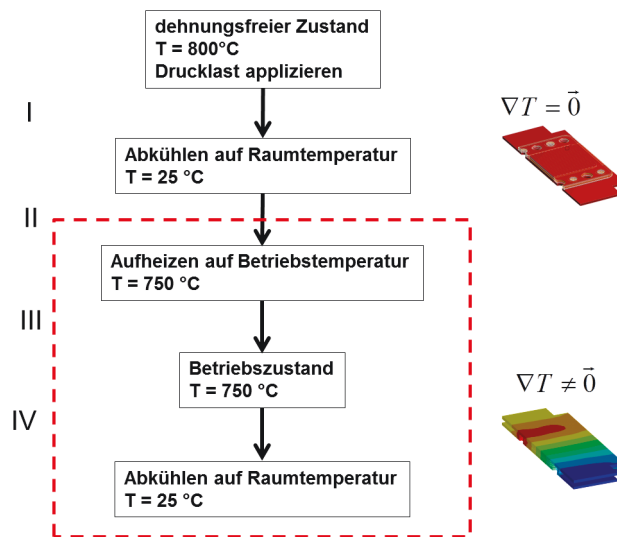


Abbildung 6.1: Prozessablauf eines Betriebszyklus

Zunächst erfolgt eine Abkühlung nach dem Zusammenfügen vom spannungsfreien Zustand bei 800°C auf Raumtemperatur (Schritt I). Dieser Prozess wird schrittweise bei angenommen gleichmäßiger Temperaturverteilung über dem Stack durchgeführt. Anschließend wird der eigentliche Prozesszyklus betrachtet, der aus den Phasen

- Aufheizen (Schritt II)
- Betrieb (Schritt III)
- Abkühlen (Schritt IV)

besteht. Zweck der Untersuchung ist die Vorhersage des fluiddynamischen und thermomechanischen Stack-Verhaltens in jeder der betrachteten Prozessphasen. Die im Stack auftretenden Temperaturfelder, Spannungen und Deformationen beeinträchtigen seine Funktionalität. Daher ist es erforderlich, sie in jeder Prozessphase zu ermitteln und zu analysieren. In den betrachteten Prozessphasen werden zur Darstellung der mechanischen Verzerrungen und Spannungen im Stahl die jeweiligen von Mises Dehnungen und Spannungen eingesetzt. Dagegen werden im Glas die entsprechenden maximalen Hauptdehnungen und Hauptspannungen verwendet.

Zunächst werden die Schritte II-IV des Prozesszyklus behandelt und anschließend erfolgt die Analyse der gesamten Prozessschritte inklusive Schritt I. Dieser Ablauf wird gewählt, da der Prozess im Schritt I mit gleichmäßiger Temperatur erfolgt und somit mit niedrigeren Spannungen verbunden ist. Im Gegensatz dazu ist die Temperaturverteilung in den anderen Schritten ungleichmäßig, weshalb ein Temperaturgradient vorhanden ist und folglich höhere Spannungen zu erwarten sind, wie in Kapitel 5 erläutert wurde. Ferner wird der Prozesszyklus als adiabat angenommen. Mit Hilfe fluiddynamischer Analysen werden diese Vorgänge untersucht, um die Temperaturprofile im Stack während der entsprechenden Prozessphasen zu ermitteln. Hierbei werden die Aufheiz- und Abkühlphasen als transient betrachtet. Im Gegensatz dazu wird die Betriebsphase als stationär angenommen. Der Verlauf der Temperatur der einströmenden Gase über die Zeit ist in Abbildung 6.2 schematisch dargestellt. Die Kurvenverläufe beschreiben die Gastemperatur während der Prozessphasen: Aufheizen, Betrieb und Abkühlen.

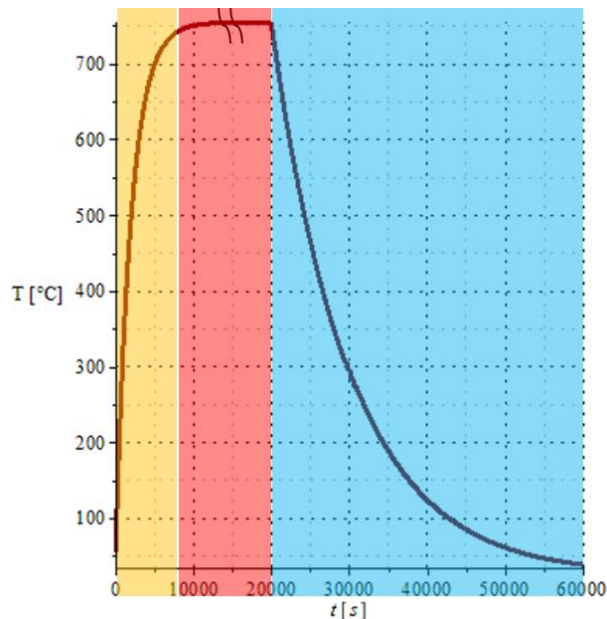


Abbildung 6.2: Schematischer Zeit-Verlauf der Gastemperatur für die Schritte II-IV

Im vorliegenden Fall erfolgt die Stack-Aufheizung mit Hilfe durchströmender heißer Gase, wobei sowohl anodenseitig als auch kathodenseitig Luft als aufheizendes Medium mit einem vorgegebenen Volumenstrom eingesetzt wird. Ausgehend von einer Anfangstemperatur, die bei 50 °C liegt, steigt die Temperatur der einströmenden Luft innerhalb eines Zeitraums von 6000 s auf einen Wert von 750 °C. Anschließend erfolgt eine stationäre Betriebsphase bei konstanter Temperatur, wobei anodenseitig anstatt der Luft Wasserstoff und Argon einströmen. Im Anschluss an der Betriebsphase werden die Gastemperaturen innerhalb von 60000 s gemäß einem exponentiellen Verlauf auf ungefähr 65 °C gesenkt.

6.2 Aufheizphase

6.2.1 gekoppelte transiente fluiddynamische Analyse

In der Aufheizphase wird die Zelle mit Hilfe durchströmender heißer Gase auf die erforderliche Betriebstemperatur gebracht. Im Folgenden wird die fluiddynamische Analyse der Aufheizphase betrachtet, die durch die Aufheizzeit und die entstehenden Temperaturgradienten charakterisiert ist. Hierbei wird zunächst der Fall untersucht, in dem die Aufheizkurve einen linearen Verlauf hat, wie in Abbildung 6.3 dargestellt.

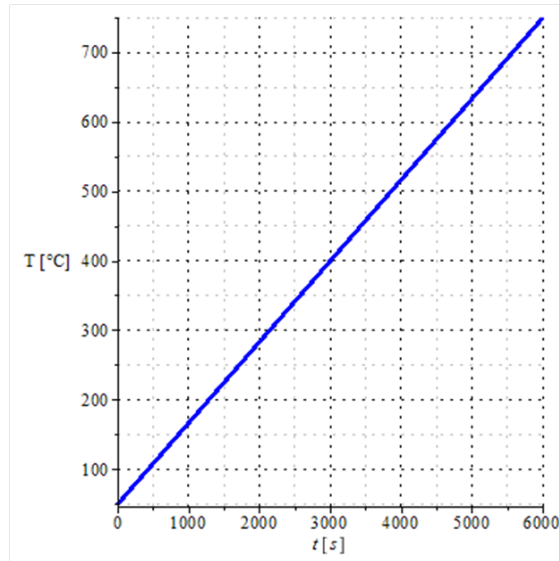


Abbildung 6.3: Lineare Aufheizkurve (Temperatur der einströmenden Luft)

Aus der Abbildung ist abzulesen, dass die zeitliche Änderung der Aufheizgeschwindigkeit, die durch die Gleichung (6.1)

$$\dot{T}_{gas} = \frac{dT_{gas}}{dt} \quad (6.1)$$

definiert ist, über den Aufheizzeitraum konstant bleibt. Den Angaben entsprechend beträgt die Aufheizgeschwindigkeit 7 °C/min. Im Allgemeinen werden auch höhere Aufheizgeschwindigkeiten angestrebt. Auf diese Thematik wird im nächsten Kapitel in mehr Einzelheiten eingegangen.

Neben dem zeitlichen Verlauf der Gastemperaturen werden als weitere Randbedingungen die Volumenströme von 5 NL/min/Ebene definiert, die sowohl anodenseitig als auch kathodenseitig gelten. In Anlehnung an die im Kapitel 2 getroffenen Annahmen bezüglich einer quasi-statischen Betrachtungsweise der thermomechanischen Aufgabe wird die thermische Last im Stack zu expliziten Zeitpunkten berücksichtigt. Demzufolge werden zur Auswertung der numerischen fluiddynamischen Analyse die im Stack resultierenden Temperaturprofile und die entsprechenden Verteilungen der Temperaturgradienten zu verschiedenen Zeiten betrachtet. Als Beispiel zeigt Abbildung 6.4 die berechneten dreidimensionalen Temperatur-

felder im Stack zu den Zeitpunkten 2000 s, 4000 s und 6000 s nach dem Start der Aufheizphase. Die Einströmtemperatur der Luft beträgt zu den entsprechenden Zeitpunkten jeweils 282 °C, 514 °C und 750 °C.

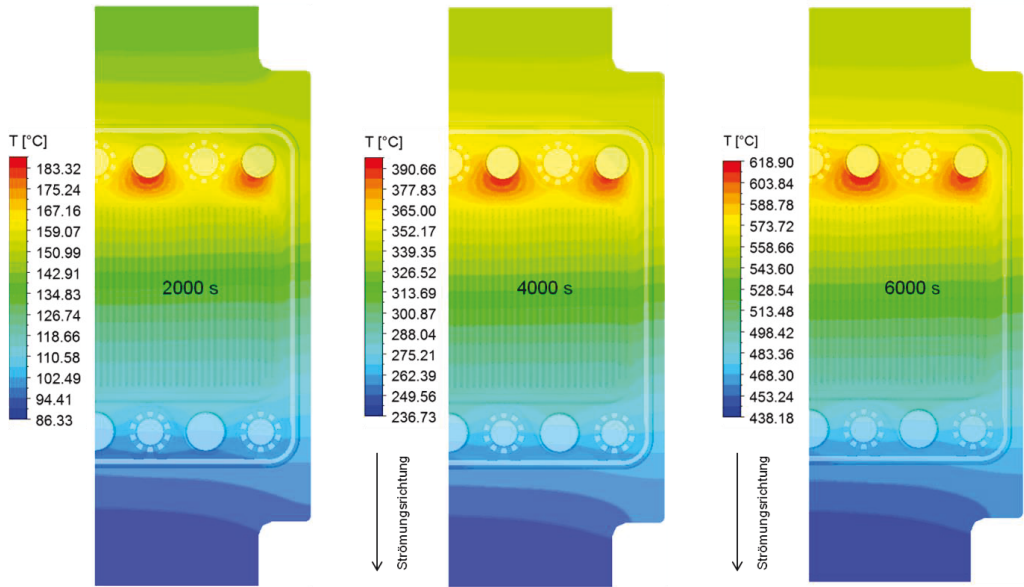


Abbildung 6.4: 3D-Temperaturverteilung im Stack während der Aufheizphase
2000 s, 4000 s und 6000 s nach dem Start der Aufheizung

Da für die Darstellung unterschiedliche Skalen verwendet werden, ist die Temperaturverteilung zu den betrachteten Zeitpunkten durch ein charakteristisches Bild gekennzeichnet. Die Stack-Temperatur fällt in Strömungsrichtung ab, wobei die höchsten Temperaturwerte in den Eintrittsbereichen der heißen Luft auftreten. Ferner sind große Differenzen zwischen den maximalen und minimalen Werten der Temperaturen vorhanden. Insbesondere im Kanalbereich verlaufen die Isothermen ungefähr senkrecht zur Strömungsrichtung, was darauf hindeutet, dass der Temperaturgradient in Strömungsrichtung das höchste Gefälle hat, da die Komponente des Temperaturgradienten parallel zu den Isothermen verschwinden muss. Dem Fourierschen Gesetz (Gleichung (6.3)) entsprechend ist die größte Komponente des Wärmeflussvektors innerhalb des Festkörpers in Strömungsrichtung.

Der Betrag des Temperaturgradienten zu den betrachteten Zeitpunkten ist in Abbildung 6.5 dargestellt. Auch hier führt die Verwendung unterschiedlicher Skalen für die Darstellung zu einem charakteristischen Bild der Verteilung des Temperaturgradienten, welches über die Zeit beibehalten wird. Der Temperaturverteilung entsprechend liegen auch die höchsten Temperaturgradienten im Eintrittsgebiet der heißen Gase. Des Weiteren nimmt der Betrag des Temperaturgradienten insbesondere in diesem Bereich mit der Zeit auf Grund inhomogener Temperaturverteilung zu. Im Laufe der Aufheizphase wird mit dem Anstieg der Temperaturen auch eine Zunahme des Betrags des Temperaturgradienten im gesamten Stack beobachtet, wie man den Darstellungen in Abbildung 6.5 entnehmen kann.

Infolge der ungleichmäßigen Temperaturverteilung in einem Festkörper sind die davon abhängigen inneren Spannungen Ortsfunktionen, zusätzlich zu ihrer Zeitabhängigkeit infolge der transienten Randbedingungen der Wärmeübertragung. Zu einem beliebigen Zeitpunkt wird die im Körper hervorgerufene Spannung sowohl durch den Temperaturgradienten als auch durch die Differenz zwischen der maximalen T_{max} und der minimalen T_{min} auftretenden Temperatur beeinflusst. Daher wird bei den nachfolgenden Simulationsberechnungen die Größe

$$\Theta = (T_{max} - T_{min}) \quad (6.2)$$

eingeführt und deren Verhalten während der transienten Prozessphasen als Funktion der Zeit ermittelt.

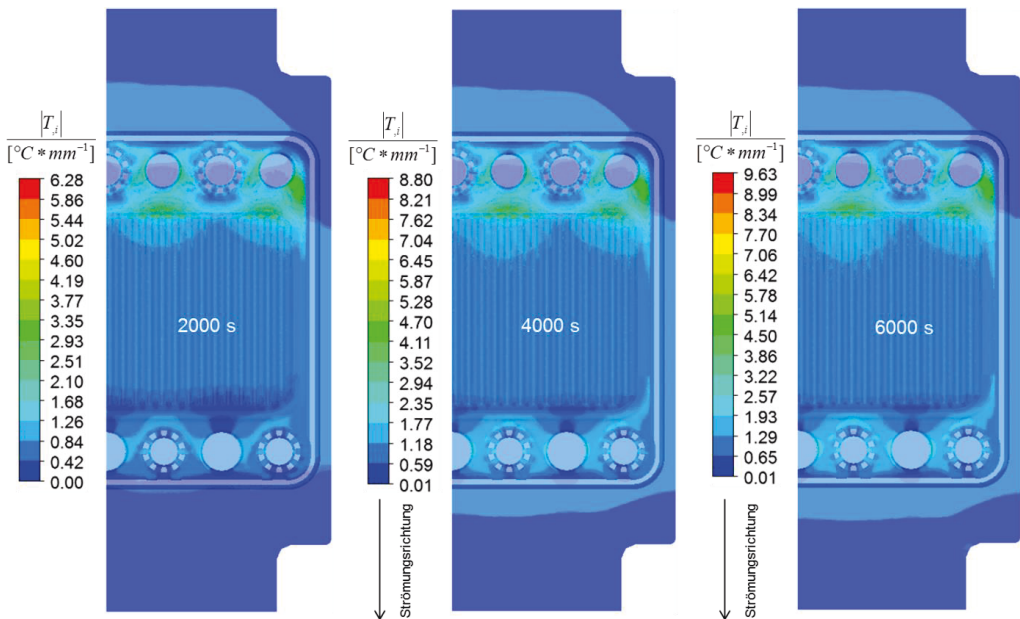


Abbildung 6.5: Betrag des Temperaturgradienten, 2000 s, 4000 s und 6000 s nach dem Start der Aufheizung

Bei komplexen Strukturen sind die maximalen Werte der hervorgerufenen Spannungen durch die Geometrie der Struktur beeinflusst, da lokale Effekte wie Kerbwirkungen zu Spannungsspitzen führen. In solchen Fällen kann eine Abschätzung der Spannung mit Hilfe der eingeführten Größe Θ relativ grob sein. Daher ist die dreidimensionale numerische thermomechanische Analyse erforderlich, um solche Fehlschätzungen zu minimieren oder ganz zu vermeiden.

Die Verläufe der ermittelten maximalen und minimalen im Festkörper auftretenden Temperaturen sind in Abbildung 6.6 dargestellt. Ferner ist zum Vergleich der Verlauf der Gastemperatur gezeigt, der erwartungsgemäß höher liegt als die Festkörpertemperatur. Die Kurvenver-

läufe von T_{max} und T_{min} sind monoton steigend über die Zeit, wobei die Steigung mit der Zeit zunimmt, wie in der Abbildung 6.6 deutlich zu erkennen ist. Der Abbildung ist weiterhin zu entnehmen, dass die Differenz zwischen den beiden Temperaturen im Laufe der Zeit größer wird.

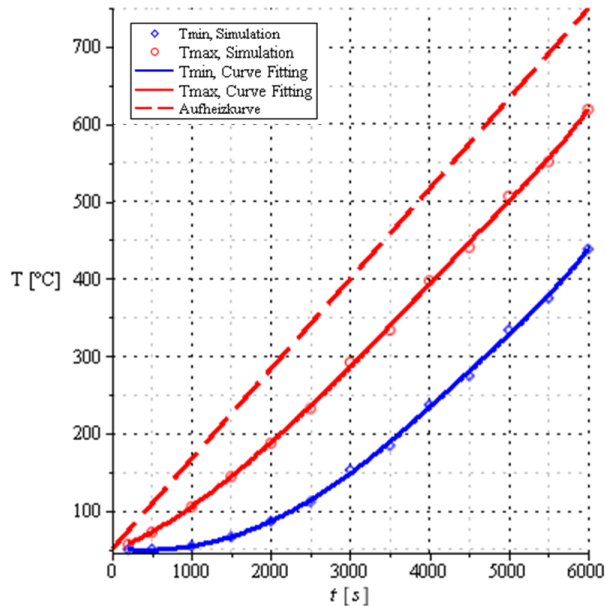


Abbildung 6.6: Aufheizkurve und Zeit-Verläufe von T_{max} und T_{min} im Festkörper

Zur genaueren Betrachtung werden die zeitlichen Verläufe der berechneten Temperaturdifferenz Θ und des maximalen Betrags des Temperaturgradienten $|T_{,t}|$ in Abbildung 6.7 verglichen. Die beiden Kurven sind durch einen ähnlichen am Anfang schnell und später langsam steigenden Verlauf charakterisiert. Das Verhalten der Kurven ist vom Vorgang der Wärmeübertragung abhängig und wird von der Konvektion zwischen Gas und Festkörper sowie von dessen Fähigkeit zur Speicherung und Weiterleitung der Wärme beeinflusst.

Wenn das heiße Gas zu strömen beginnt, wird infolge des Temperaturunterschieds zwischen Gas und Festkörper die Wärme zum Festkörper transportiert. Dabei nehmen zunächst die Eintrittsbereiche des Festkörpers die Energie der heißen Gase auf, so dass die Temperatur in diesen Bereichen schnell steigt und die Erwärmung des Festkörpers in Strömungsrichtung mit Verzögerung nachfolgt. Im Laufe der Zeit bilden sich im Festkörper ausgeprägte Temperaturprofile und -gradienten. Wenn der Wärmeübergangskoeffizient und somit die Wärme-konvektion groß sind, erhöht sich die Temperatur im Eintrittsbereich der Gase sehr schnell. Dies erzeugt eine höhere Temperaturdifferenz zwischen den Ein- und Ausströmungsbereichen der heißen Gase im Festkörper, bis die aufgenommene Wärme innerhalb des Festkörpers genauso schnell weitergeleitet wird.

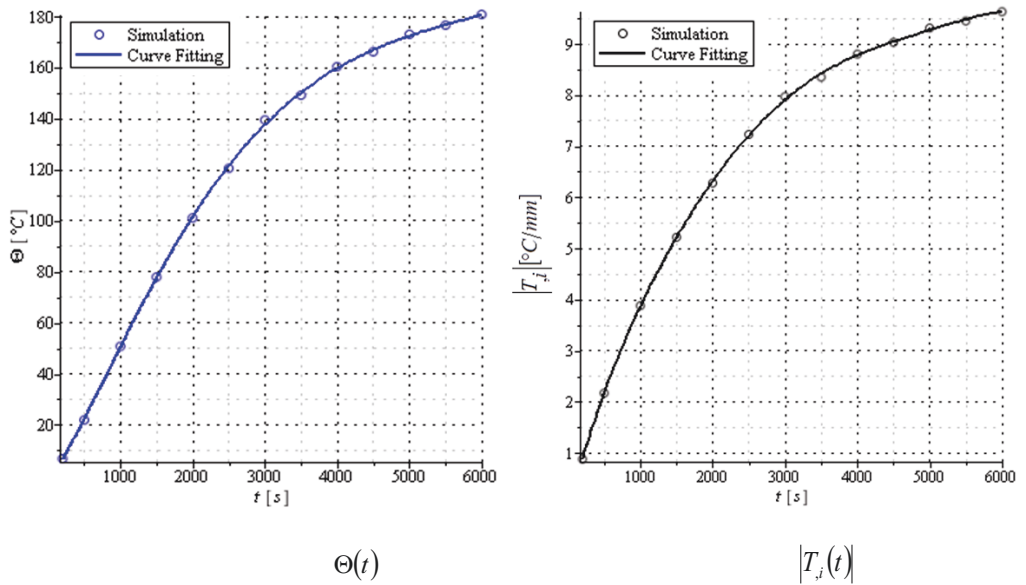


Abbildung 6.7: Zeit-Verläufe der Temperaturdifferenz und -gradienten

Folglich ist die maximale Temperaturdifferenz innerhalb des Körpers Θ stark von seiner Fähigkeit abhängig, die Wärme intern weiterzuleiten relativ zur Fähigkeit des Gases, konvektive Wärme über die Oberfläche des Körpers einzuführen. Ein Maß für die Beschreibung des relativen Betrags der beiden Wärmemengen ist durch die Biot-Zahl¹ (Bi) gegeben. Berücksichtigt man, dass die in eine Richtung n_i geleitete Wärme gemäß dem Fourierschen Gesetz

$$q = -\lambda * (T_{,i} n_i) \quad (6.3)$$

ausgedrückt wird, wobei λ die Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers darstellt, besteht ein Zusammenhang zwischen der maximalen Temperaturdifferenz Θ innerhalb des Festkörpers und dem maximalen Betrag des entstehenden Temperaturgradienten $|T_{,i}|$ gemäß

$$|T_{,i}| \propto \Theta \quad (6.4)$$

Um einen Vergleich beider Größen zu ermöglichen, werden sie auf die jeweiligen über den Aufheizzeitraum erreichten Maximalwerte gemäß den Vorschriften

$$\eta_i(t) = \frac{\Theta(t)}{\max(\Theta(t))} \quad (6.5)$$

und

¹ $Bi = h * L / \lambda$, mit: L = charakteristische Länge des Festkörpers, λ = spezifische Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers, h = Wärmeübergangskoeffizient

$$\eta_2(t) = \frac{|T_d(t)|}{\max(|T_d(t)|)} \quad (6.6)$$

normiert. Die resultierenden Verläufe der Größen η_1 und η_2 über die Zeit sind in Abbildung 6.8 dargestellt. In der normierten Darstellung wird die Ähnlichkeit der Kurvenverläufe noch deutlicher. Dieses Verhalten wird auch bei der zeitabhängigen Abkühlphase beobachtet.

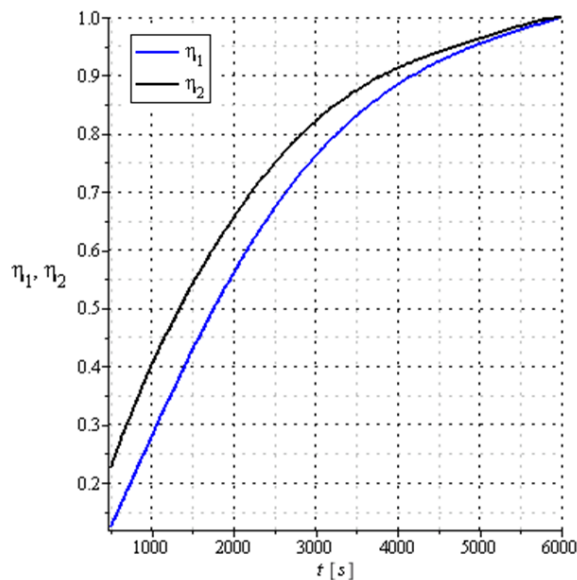


Abbildung 6.8: Zeit-Verlauf von η_1 und η_2

6.2.2 Thermomechanische Analyse

6.2.2.1 Randbedingungen

Während des betrachteten Prozesses ändern sich die mechanischen Auflagerreaktionen infolge der thermischen Last, die schrittweise als Zeitfunktion eingesetzt wird. Weiterhin sind die Materialeigenschaften auch temperaturabhängig und aufgrund der Materialinhomogenität ortsabhängig. Zusätzliche Auswirkungen werden durch die ungleichmäßige Temperaturverteilung innerhalb des Stacks verursacht. Zusammen führen diese Einflussparameter zu einem dreidimensionalen komplexen Spannungszustand.

Ziel der thermomechanischen Analyse ist es, die infolge der mechanischen und thermischen Belastung im Stack auftretenden Spannungen, Verzerrungen und Deformationen zu ermitteln. Große Spannungen können zum Bruch einzelner Komponenten des Stacks oder zum Versagen des Verbundes zusammengefügtter Elemente führen. Andererseits beeinträchtigen

große Formänderungen die Funktionalität des Stacks und damit seine Gebrauchstauglichkeit. Daher werden im Folgenden die Verteilungen der thermischen Dehnungen und mechanischen Verzerrungen sowie der Spannungen im Stack während der Aufheizphase betrachtet. Wie am Anfang des Kapitels beschrieben, werden die Feldgrößen zu mehreren Zeitpunkten ermittelt, damit eine ausreichende Auflösung des zeitlichen Verhaltens dieser Größen sichtbar wird. Von besonderem Interesse sind die Orte, wo diese Größen Maximalwerte annehmen, da diese Bereiche infolge Bruchs oder durch große Verformungen gefährdet sind und ihre Ermittlung ein wichtiger Bestandteil der Analyse ist.

Die vorher betrachtete numerische fluiddynamische Analyse der Aufheizphase liefert die Beschreibung der thermischen Belastung, welche für die nachfolgende thermomechanische Analyse des Stack-Verhaltens benötigt wird. Zu diesem Zweck werden die zu den betrachteten Zeitpunkten ermittelten Temperaturfelder auf das Rechnetz des FE-Modells interpoliert. Aufgrund der zeitabhängigen Temperaturverteilung im Stack während der transienten Prozessphasen ist es erforderlich, die Temperaturfelder aus der fluiddynamischen Analyse mit Hilfe von Macros in der FE-Simulation zu integrieren. Dieser Schritt erfolgt durch den Einsatz der ANSYS-Programmiersprache APDL. Unter Berücksichtigung der bekannten thermischen Lasten, der mechanischen Randbedingungen sowie der implementierten Materialmodelle können die entsprechenden strukturmekanischen Analysen mit Hilfe des FE-Modells durchgeführt werden, um anschließend die oben genannten Feldgrößen zu den jeweiligen Zeitpunkten zu ermitteln. Als Materialkombination wird der ITM-Stahl mit dem Glas G87opt betrachtet.

6.2.2.2 Thermische Dehnungen

In Abbildung 6.9 ist die Verteilung der thermischen Dehnung in den Kassetten dargestellt, wobei zur besseren Einsicht die Grund- und die Deckplatte entfernt sind.

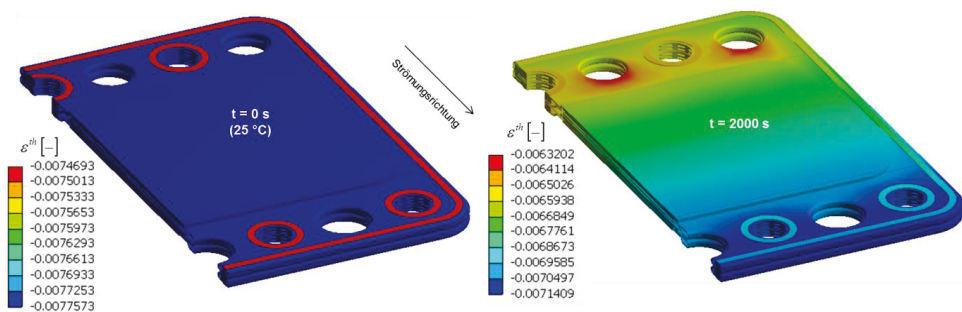


Abbildung 6.9: Verteilung der thermischen Dehnung am Anfang und 2000 s nach dem Start der Aufheizung

Das linke Bild zeigt den Zustand am Ende der isothermen Abkühlung auf Raumtemperatur nach dem Zusammenfügen, weshalb nur zwei Dehnungsbereiche vorliegen, nämlich Stahlbereich und Glasbereich. Dazu vergleiche man die Abbildung 5.11. Das rechte Bild zeigt die

thermischen Dehnungen im Stack 2000 s nach dem Start der Aufheizung. Zu diesem Zeitpunkt hat sich bereits ein ausgeprägtes Profil der Temperaturverteilung ausgebildet. Ähnliches gilt für die in Abbildung 6.10 gezeigten thermischen Dehnungen, die den Zustand des Stacks jeweils nach 4000 s und 6000 s der Aufheizzeit darstellen. Daraus lässt sich folgern, dass sich das Bild der räumlichen Verteilung der thermischen Dehnung mit der Zeit wenig ändert. Wie bereits erwähnt, haben die Temperaturverteilung und das Profil der thermischen Dehnung ein ähnliches charakteristisches Bild. Die räumliche Abhängigkeit der Verteilung der thermischen Dehnung ist dadurch gekennzeichnet, dass sie in Strömungsrichtung betragsmäßig zunimmt. Dies liegt daran, dass die Differenzen zwischen der spannungsfreien Referenztemperatur und den im Stack herrschenden lokalen Temperaturen in Strömungsrichtung steigen.

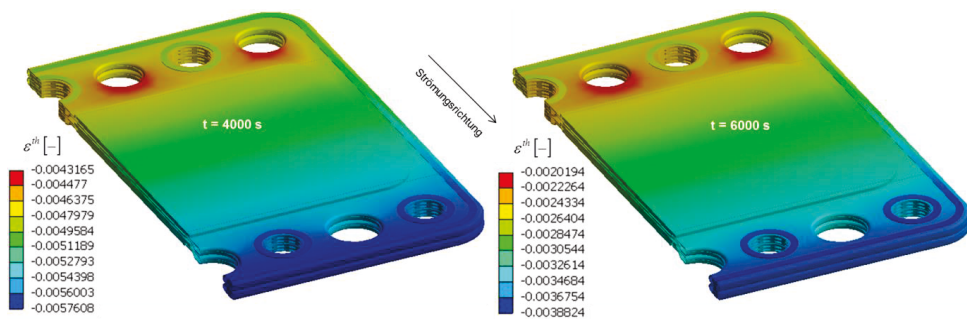


Abbildung 6.10: Verteilung der thermischen Dehnung 4000 s und 6000 s nach dem Start der Aufheizung

Aus dem gleichen Grund nehmen die absoluten Werte der thermischen Dehnungen an jeweiligen Ort mit steigenden Temperaturen während der Aufheizphase über die Zeit ab, da der Abstand zur Referenztemperatur geringer wird. Dieses Verhalten wird in Abbildung 6.11 anhand des zeitlichen Verlaufs der örtlich maximalen thermischen Dehnung verdeutlicht. Wie in den Abbildungen 6.9 und 6.10 zu erkennen ist, treten die höchsten thermischen Dehnungen im Ausströmbereich der Gase auf.

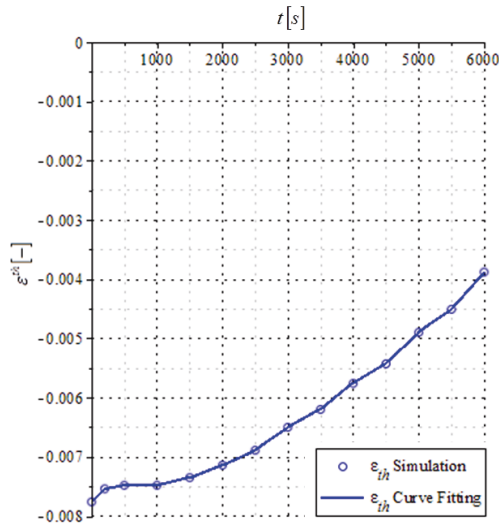


Abbildung 6.11: Zeitlicher Verlauf der thermischen Dehnung

6.2.2.3 Mechanische Verzerrungen

Im Unterschied zu den thermischen Deformationen, die lediglich Dehnungen oder Schrumpfungen verursachen, rufen die mechanischen Formänderungen durch angreifende äußere Lasten zusätzliche Winkelverzerrungen hervor. Im betrachteten Fall entstehen sie zunächst durch die aufgebrachte Last von 500 N und die Auflagerreaktionen, die für die Gewährleistung der elektrischen Kontaktierung verantwortlich sind. Zusätzlich werden mechanische Verzerrungen durch Behinderung der thermischen Deformation infolge der mechanischen Auflagerung, der Materialinhomogenität und des Temperaturgradienten hervorgerufen.

Wie bereits erläutert, sind die thermischen Dehnungen bei Raumtemperatur am größten. In Abbildung 6.12 werden die zeitlichen Verläufe der thermischen und der mechanischen Dehnungen verglichen. Die absoluten Beträge der thermischen Dehnung sind im rechten Teil der Abbildung dargestellt, wobei zu erkennen ist, dass im Laufe des Aufheizprozesses die thermischen Dehnungen betragsmäßig abnehmen, während die mechanischen Dehnungen zunehmen. Ferner haben die thermischen Dehnungen wesentlich höhere Beträge zu den betrachteten Zeitpunkten.

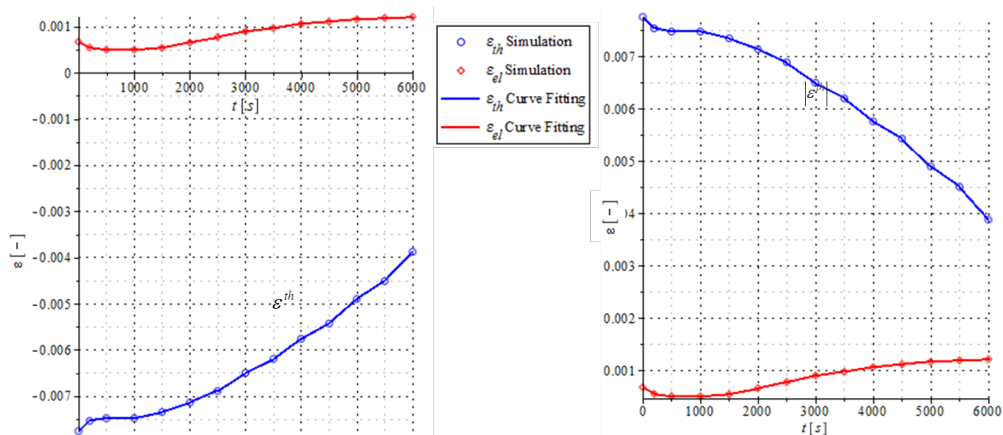


Abbildung 6.12: Zeitlicher Verlauf der thermischen und mechanischen Dehnungen

Die räumliche Verteilung der mechanischen Verzerrung wird in Abbildung 6.13 betrachtet. Im oberen Teil der Abbildung sind die mechanischen Verzerrungen am Ende des isothermen Abkühlvorgangs (0 s) sowie 2000 s nach dem Start der Aufheizphase dargestellt.

Zum Zeitpunkt 0 s ist die Temperatur noch gleichmäßig verteilt, weshalb keine Temperaturgradienten vorhanden sind. Folglich sind die verursachten mechanischen Verzerrungen aufgrund der applizierten mechanischen Last und Auflagerungsbedingungen sowie infolge der gegenseitigen Verformungsbehinderung bedingt, die auf unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten der verschiedenen Werkstoffe zurückzuführen sind. Die mechanischen Verzerrungen treten hauptsächlich in den Übergangsbereichen zwischen den metallischen Komponenten und dem Glas auf, wo die Last eingeleitet wird. Die zeitliche Abhängigkeit des Verzerrungsfeldes wird durch Abbildung 6.13 verdeutlicht, in der die Verteilung der Feldgröße zu den weiteren Zeitpunkten 2000 s, 4000 s und 6000 s gezeigt wird. In den Darstellungen erhält die räumliche Verteilung der mechanischen Verzerrung im Stack ihr charakteristisches Bild, wo die maximalen Werte im Einströmungsbereich der Gasversorgung liegen. Des Weiteren fallen die mechanischen Verzerrungen in Strömungsrichtung ab. Dies lässt sich dadurch erklären, dass die Temperaturgradienten in diese Richtung abnehmen. Den Erläuterungen im Abschnitt 5.3 entsprechend hat der Temperaturgradient starken Einfluss auf die im Stack verursachten Spannungen. Diese sind durch einen direkten Zusammenhang über das Materialmodell mit den mechanischen Verzerrungen verknüpft.

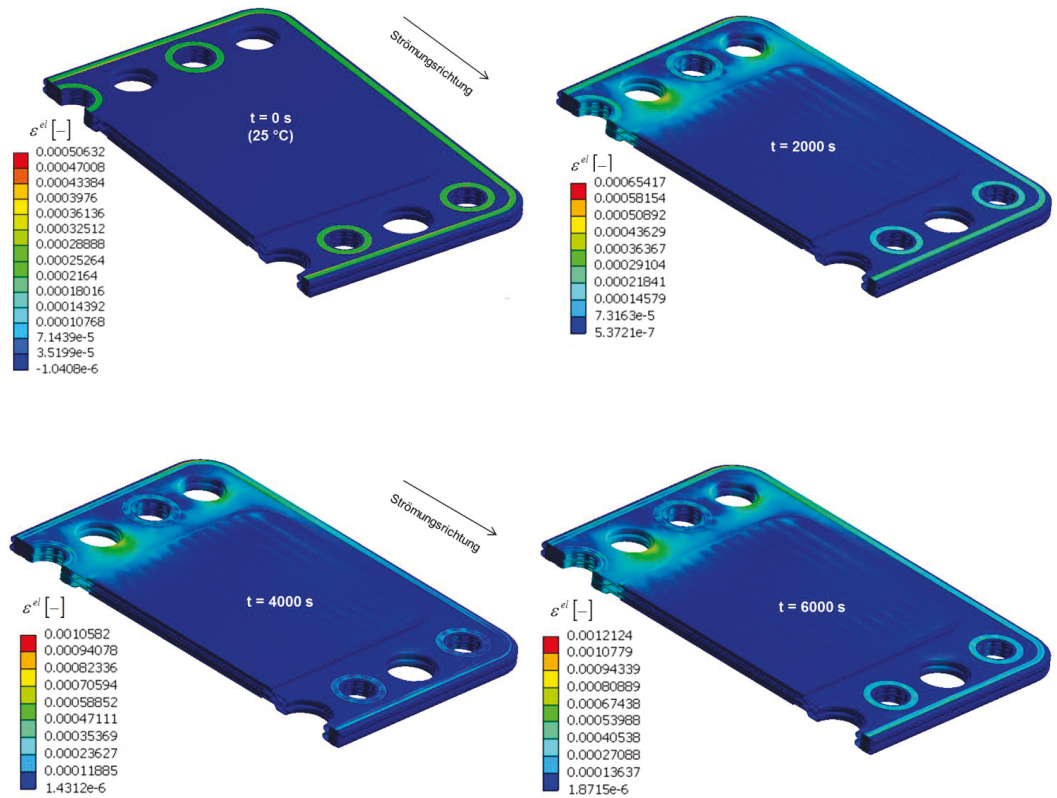


Abbildung 6.13: Räumliche Verteilung der mechanischen Verzerrungen während der Aufheizphase (0 s – 6000 s)

6.2.2.4 Spannungsverteilung

Zu den betrachteten Zeitpunkten der Aufheizphase werden die entsprechenden Verteilungen der hervorgerufenen Spannungen ermittelt. Die maximalen im Stack auftretenden Spannungen nehmen während des Aufheizens mit der Zeit zu, wie Abbildung 6.14 sowohl für Stahl als auch für Glas verdeutlicht. Dies lässt sich dadurch begründen, dass die mechanischen Verzerrungen infolge wachsender Temperaturen zunehmen, wie im vorigen Abschnitt erläutert. Ferner steigt in dem betrachteten Temperaturbereich der Unterschied zwischen den Wärmeausdehnungskoeffizienten vom Glas und Stahl, was zur weiteren Behinderung der Deformation führt und somit zu höheren Spannungen. Ausgehend vom Anfangszustand des Aufheizprozesses, der durch die Bedingung

$$\begin{aligned} t &= 0 \\ T &= 50^\circ\text{C} \end{aligned} \quad (6.7)$$

definiert wird, erfolgt die Aufheizung des Stacks. Die am Ende der Aufheizphase zum Zeitpunkt 6000 s erreichte räumliche Verteilung der Spannung ist in Abbildung 6.15 dargestellt.

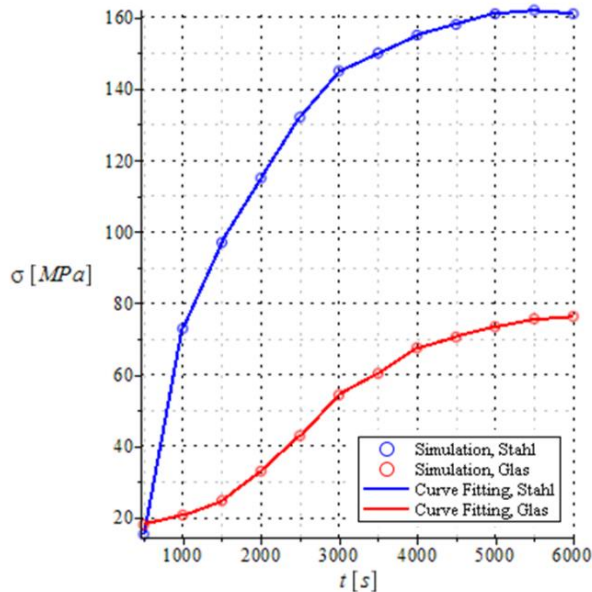


Abbildung 6.14: Zeitlicher Verlauf der Spannungen

Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass die maximalen Spannungen zum jeweiligen Zeitpunkt im Einstromungsbereich der heißen Gase erscheinen. Wie die fluiddynamische Untersuchung gezeigt hat, existieren in dieser Umgebung die höchsten Temperaturgradienten. Zusätzlich existiert in diesem Bereich ein Strukturverbund, da verschiedene Komponenten mit unterschiedlichen Steifigkeiten zusammengefügt sind. Diese Einflussfaktoren führen zusammen zur Behinderung der Stack-Verformung, was schließlich höhere Spannungen verursacht. Daher wird im Folgenden dieser Bereich isoliert vom Rest des Stacks betrachtet und auf die hochbelasteten Gebiete der einzelnen Materialien eingegangen. Zu diesem Zweck wird die im Abschnitt 4.3.7 vorgestellte Submodeling-Technik eingesetzt.

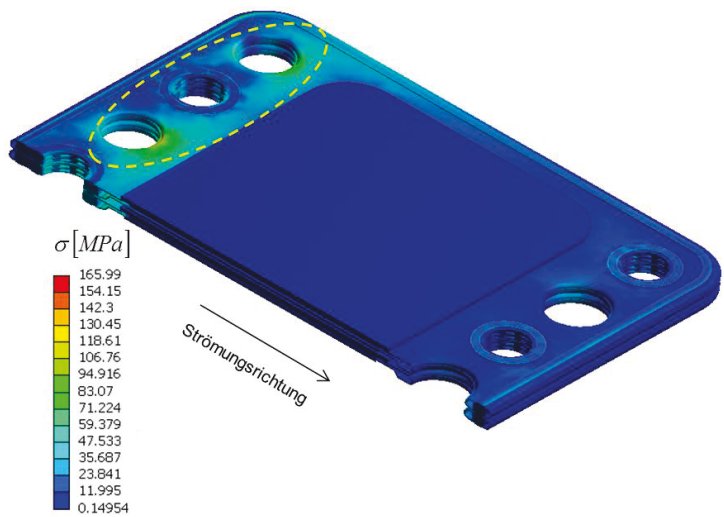


Abbildung 6.15: Spannungen in den Kassetten

Die ermittelten Berechnungsergebnisse bei näherer Betrachtung der Bereiche, wo die maximalen Spannungen auftreten, sind in den Abbildungen 6.16 und 6.17 zu sehen. In der Umgebung des Einströmungsbereichs der heißen Gase in den Oberschalen und Unterschalen erreichen die maximalen Spannungen Werte von 166 MPa, wie in Abbildung 6.16 dargestellt. Im Vergleich dazu liegen die Höchstwerte der Spannungen im Glaskörper bei 76 MPa, wie Abbildung 6.17 zeigt.

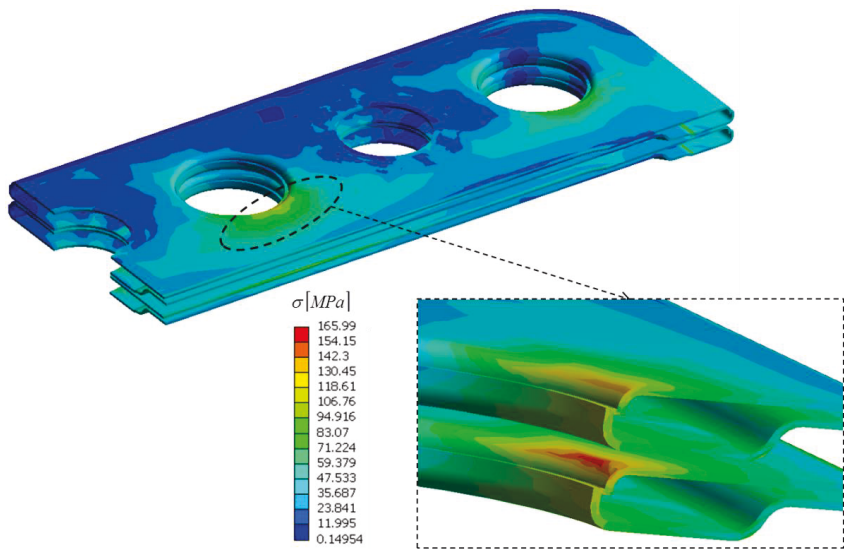


Abbildung 6.16: Spannungen im Einströmungsbereich der Ober- und Unterschalen

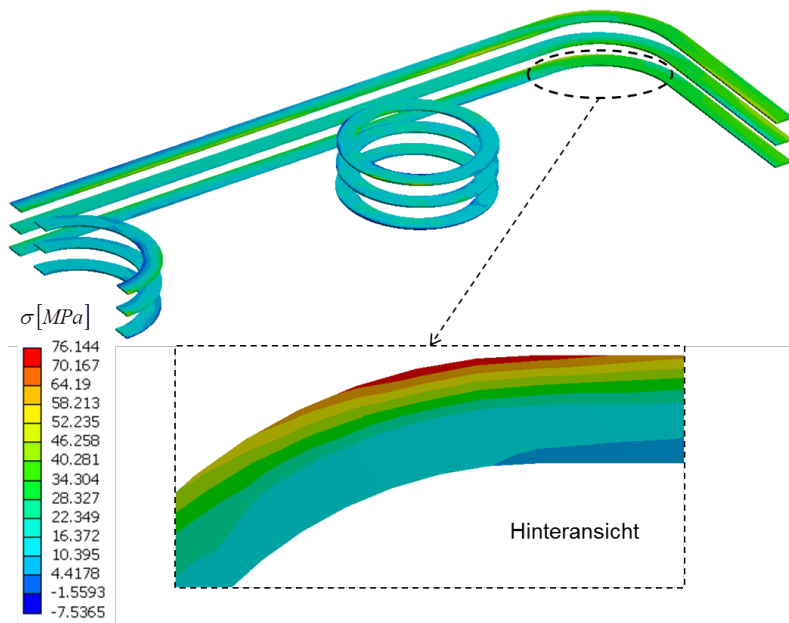


Abbildung 6.17: Spannungen im Glaskörper

Das Spannungsverhalten in der Glasfügung im Bereich, wo die maximale Spannung auftritt, wird in Abbildung 6.18 genauer betrachtet. Zu diesem Zweck wird der Spannungsverlauf als Längenfunktion der Kurve, die durch die krummlinige Koordinate ζ zwischen den Punkten 1 und 2 entlang der Glaskörperkante definiert ist, dargestellt. Der ermittelte Verlauf der Spannung am Ende der Aufheizphase zeigt deutlich, wo die Spannung ihren Maximalwert annimmt. Im betrachteten Bereich herrscht große Bewegungsfreiheit, da am äußeren Rand des Stacks keine mechanische Behinderung der Deformation vorliegt. Durch den kleineren Wärmeausdehnungskoeffizienten der Stahlkomponenten im Vergleich zur Glasfügung neigen sie aufgrund der lokalen Temperaturen weniger zum Schrumpfen. Da die Stahlelemente zusätzlich höhere Steifigkeiten besitzen, dominieren sie das Verformungsverhalten der Struktur. Folglich wird das Schrumpfen der Glasfügung verhindert, weshalb höhere Spannungen auftreten. Die Auswirkungen der Behinderung der thermischen Verformung infolge der Materialinhomogenität durch die Existenz unterschiedlicher Wärmeausdehnungskoeffizienten und verschiedener Struktursteifigkeiten werden deutlich.

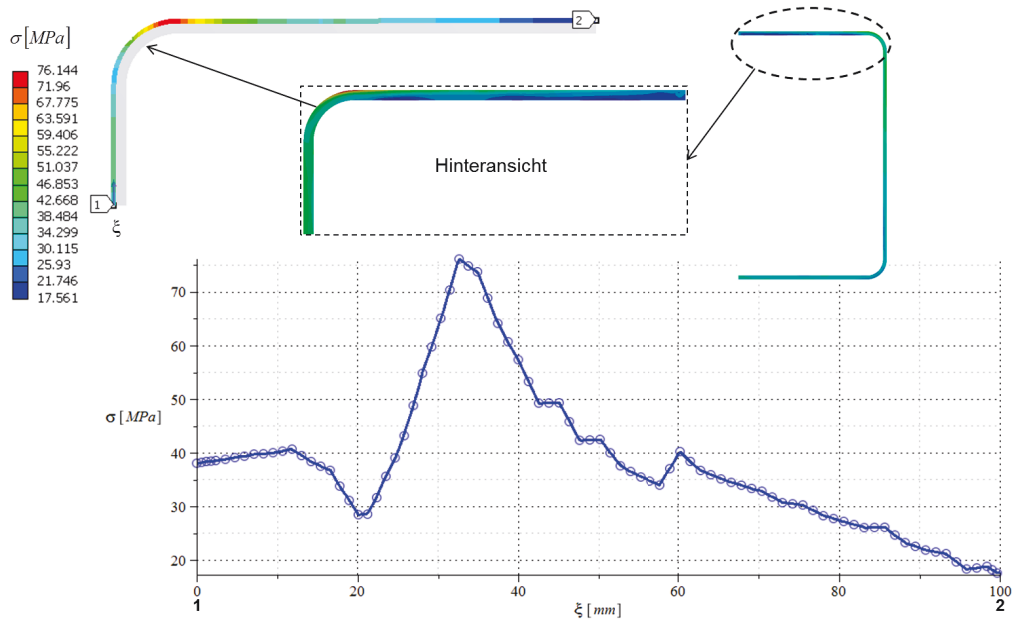


Abbildung 6.18: Spannungsverlauf im Glaskörper entlang der Kante ξ

6.2.2.5 Verschiebungsfeld

Die Formänderung des Stacks beeinflusst die Kontaktierung der einzelnen Komponenten und kann somit seine Gebrauchstauglichkeit beeinträchtigen. Aus diesem Grund ist es erforderlich, die in der Struktur auftretenden Verschiebungen zu analysieren. In Abbildung 6.19 ist das Verschiebungsfeld in den Kassetten nach dem isothermen Abkühlen auf Raumtemperatur dargestellt. In diesem Zustand treten die maximalen Verformungen auf. Im linken Teil der Abbildung ist der Betrag der Gesamtverschiebung gezeigt, während im rechten Teil des Bildes der Betrag der Radialkomponente des Verschiebungsvektors bezogen auf das dargestellte zylindrische Koordinatensystem zu sehen ist. Der Vergleich zeigt, dass die beiden Bilder fast identisch sind, woraus folgt, dass die Tangential- und die Axialkomponenten des Verschiebungsvektors einen geringen Beitrag zur Gesamtverschiebung leisten. Bei der vorliegenden Geometrie und unter den gegebenen Randbedingungen schrumpft der Stack in radialer Richtung zusammen.

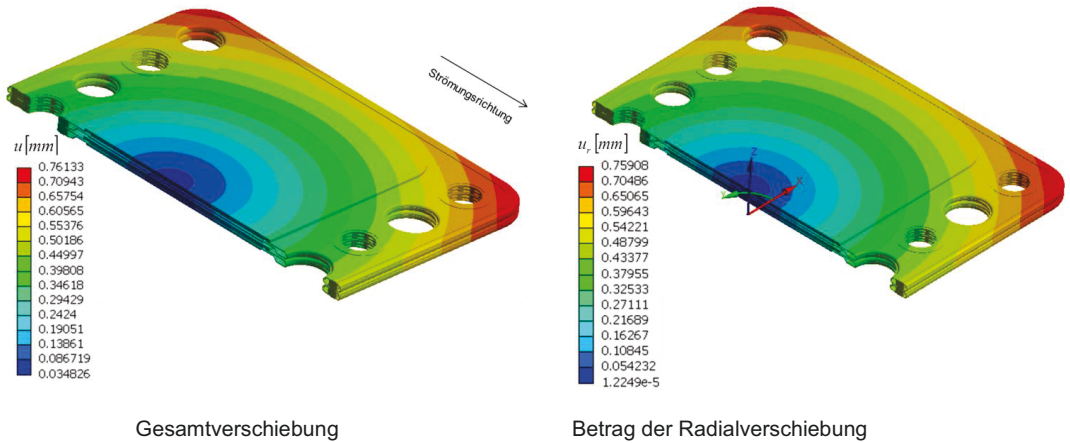
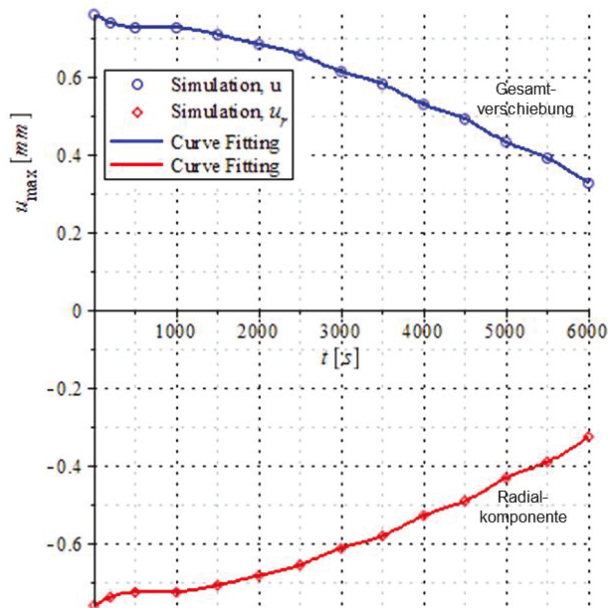


Abbildung 6.19: Verschiebungsfeld nach dem isothermen Abkühlen

Die Ähnlichkeit der Profile der Gesamtverschiebung und der Radialkomponente existiert während der isothermen Abkühlphase auf Grund der homogenen Temperaturverteilung und bedingt durch den näherungsweise symmetrischen Aufbau des Stacks. Ferner sind die zeitlichen Verläufe der Höchstwerte beider Größen spiegelsymmetrisch bezüglich der Zeitachse, wie Abbildung 6.20 zeigt.



Weiterhin wird die Symmetrie des Verschiebungsfeldes in Abbildung 6.21 noch deutlicher zu erkennen, wenn man die Vektordarstellung der Verschiebung entlang der äußeren Kannte der Unterschale in der Mitte der Abbildung 6.21 betrachtet, wobei die Vektoren beinahe zu einem Zentrum hinzeigen. Die Vektoren liegen in einer Ebene, da die Verschiebungskomponente senkrecht zur Zellen-Ebene u_z sehr gering ist, wie im Folgenden gezeigt wird. Der Kantenverlauf wird durch die Koordinate ξ im linken Teil der Abbildung 6.21 beschrieben, mit deren Hilfe der Kurvenverlauf des Betrags der Verschiebung dargestellt wird. Die dargestellte Kurve im rechten Teil der Abbildung 6.21 zeigt zwei lokale Maxima, die den Verschiebungswerten an den Ecken der Unterschale entsprechen, wobei die untere Ecke geringfügig größere Verschiebung erfährt.

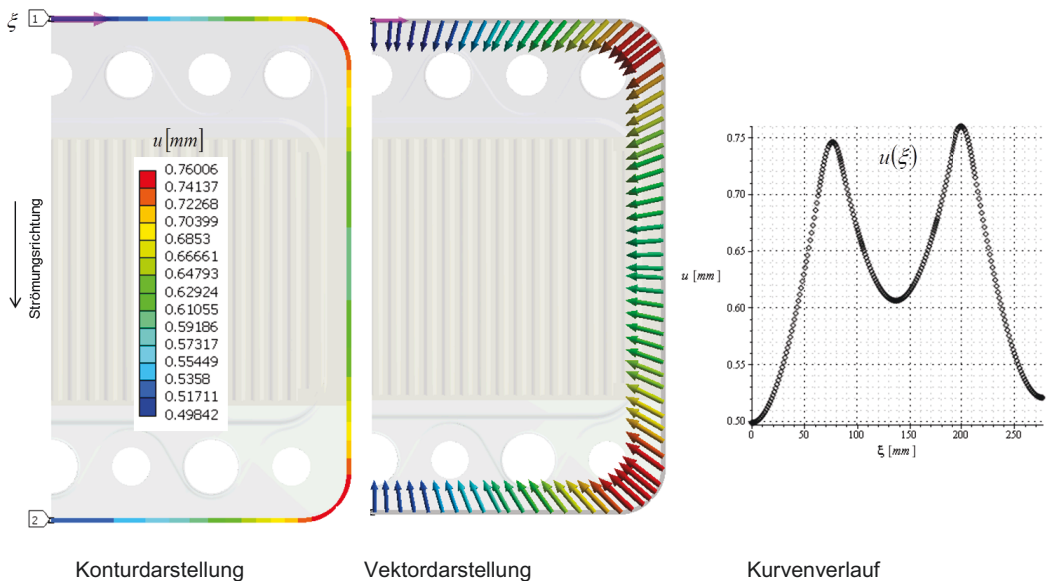


Abbildung 6.21: Verschiebungsdarstellung entlang einer Unterschalenkannte

Die maximalen Verschiebungen sind in der Größenordnung von 0,76 mm und liegen, räumlich betrachtet, in den äußeren Ecken des Stacks, da in diesen Bereichen keine mechanischen Deformationsbehinderungen vorliegen. Zeitlich betrachtet, treten die maximalen Deformationen Aufgrund der größten Differenz zwischen der herrschenden Stack-Temperatur und der spannungsfreien Referenztemperatur bei Raumtemperatur auf, bevor die Aufheizphase gestartet wird.

Für den Kontakt zwischen den Stack-Elementen ist die Verschiebungskomponente in z -Richtung u_z maßgeblich. Ihre räumliche Verteilung zum Zeitpunkt, wo das Maximum erreicht wird, ist in Abbildung 6.22 gezeigt. Hierbei ist zu erkennen, dass die betragsmäßigen Höchstwerte von u_z in der Größenordnung von

$$|u_z| = 0,0726 \text{ mm} \quad (6.8)$$

liegen. Diese Komponente des Verschiebungsvektors ist sehr gering und bildet lediglich 9,5% des gesamten Vektorbetrags zum betrachteten Zeitpunkt der Verteilung.

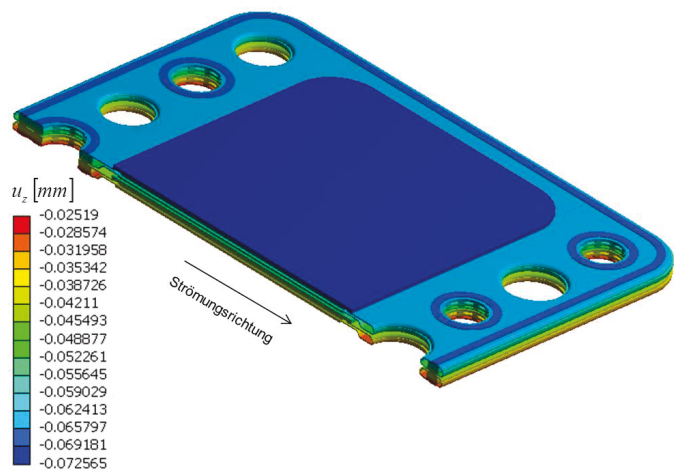


Abbildung 6.22: u_z -Verschiebungskomponente nach dem isothermen Abkühlen

Zum Zeitpunkt 0 s am Anfang der Aufheizphase sind die kartesischen Komponenten des Verschiebungsfeldes u_x , u_y , u_z in den jeweiligen Koordinatenrichtungen x , y und z in Abbildung 6.23 dargestellt. Den vorherigen Erläuterungen entsprechend ist aus der Darstellung ersichtlich, dass die Verschiebungen in z -Richtung am kleinsten sind. Ferner sind die anderen Verschiebungskomponenten u_x und u_y nahezu parallel zur jeweiligen Koordinatenrichtung. Diese charakteristischen Verläufe führen zur näherungsweise kreisförmigen Isolinen-Verteilung des Vektorbetrags, wie in Abbildung 6.19 zu erkennen ist und in Abschnitt 4.3.5.4 gezeigt wurde.

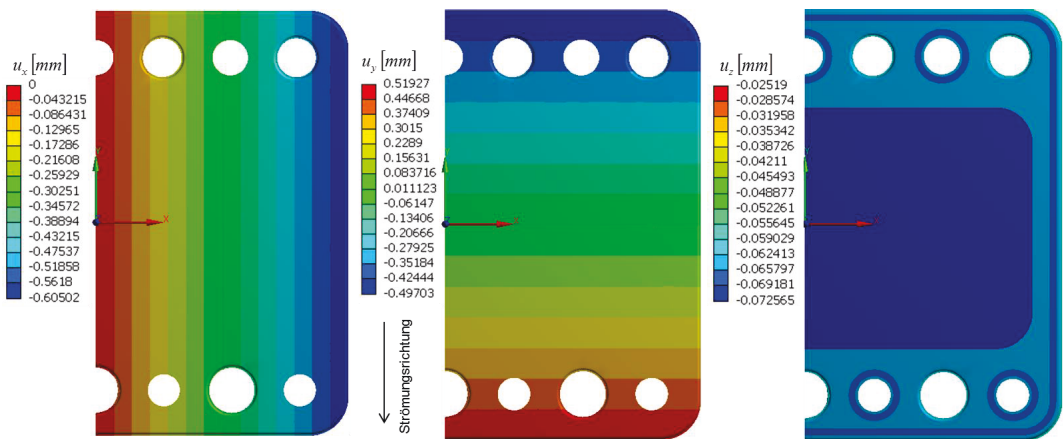


Abbildung 6.23: Verschiebungskomponenten

Von entscheidender Bedeutung ist der Betrag der Verschiebung der Zellenebene, weshalb er zur weiteren Erläuterung herangezogen wird. Hierzu wird die Verschiebungsverteilung zu unterschiedlichen Zeitpunkten über den zweidimensionalen Raum einer Zellenebene aufgetragen. In Abbildung 6.24 sind die Verschiebungsfelder am Anfang und am Ende der Aufheizphase sowie während der Betriebsphase und am Ende der Abkühlphase dargestellt. Aufgrund der niedrigeren Temperatur am Anfang der Aufheizphase sind die Verschiebungen höher als in den anderen betrachteten Zeitpunkten des Prozesses. Die maximalen Verschiebungen treten an den äußeren Ecken auf und erreichen Werte von ungefähr 0,57 mm. Am Ende der Aufheizphase führen die höheren Temperaturen im Stack zur Abnahme der Verschiebungen, deren Höchstwerte in diesem Fall bei 0,23 mm liegen. Während der Betriebsphase liegen die Stack-Temperaturen näher bei der spannungsfreien Referenztemperatur und folglich erreichen die auftretenden Verschiebungen ihre kleinsten Werte. Anschließend sinken die Stack-Temperaturen während der Abkühlphase, weshalb die Verschiebungswerte wieder ansteigen.

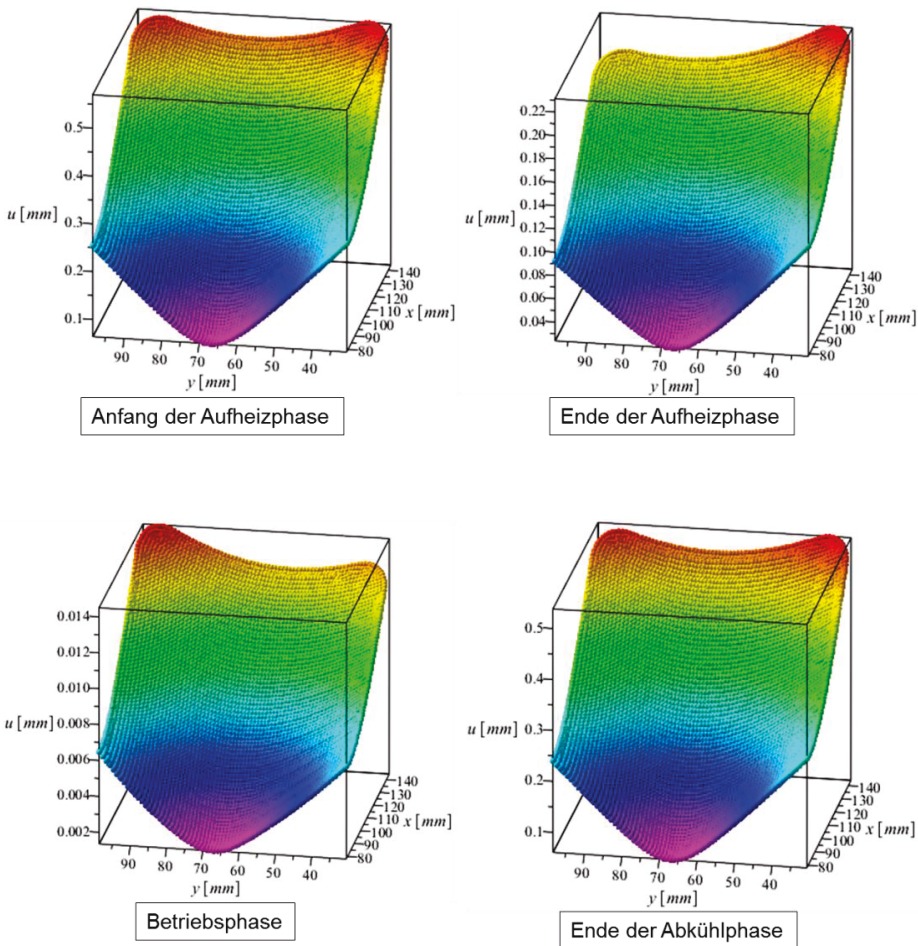


Abbildung 6.24: Darstellung der Knotenverschiebung über der Zellenebene

Der Betrag der Verschiebungskomponente in z -Richtung, dessen Maximum am Anfang der Aufheizphase auftritt, ist in Abbildung 6.25 dargestellt. Diese Größe nimmt einen sehr kleinen Wert an. Ferner ist aus der Abbildung deutlich zu erkennen, dass ihre räumliche Variation in der betrachteten Ebene sehr gering ist. Der ermittelte Betrag von u_z liegt zwischen 0,06375 und 0,06415 mm.

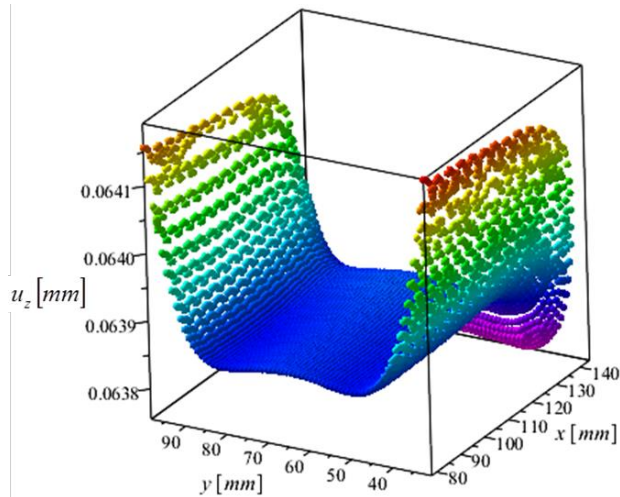


Abbildung 6.25: Verschiebungskomponente senkrecht zur Zelle

Während der Aufheizphase entsteht im Stack ein inhomogenes Temperaturfeld, das zu einer Verzerrung der charakteristischen konzentrischen Kreise insbesondere im Ausströmungsbereich der Gase führt. Zum Zeitpunkt 6000 s am Ende der Aufheizphase ist das charakteristische Bild des Verschiebungsfeldes nur noch im mittleren Bereich zu erkennen. Die Verschiebungsverteilung ändert sich im Bereich des unteren Randes und weicht vom kreissymmetrischen Bild ab. Die skalierte Darstellung der Deformation in Abbildung 6.26 verdeutlicht die Verzerrung der charakteristischen konzentrischen Kreise im Ausströmungsbereich des Stacks.

Diese Änderung liegt daran, dass im Laufe des Aufheizvorgangs die Deformationen im Stack geringer werden, da der Stack heißer wird und der Abstand zur spannungsfreien Referenztemperatur abnimmt. Bei zeitlicher Betrachtung der maximalen Verschiebungen in den Kassetten fällt auf, dass sich der Unterschied zwischen den lokalen Maxima vergrößert. Grund dafür ist die Tatsache, dass die Temperatur im Einströmbereich der Gase rascher zunimmt als im Ausströmungsbereich. Folglich verringert sich der Abstand zur spannungsfreien Referenztemperatur im Einströmungsbereich schneller und somit erfährt dieser Bereich kleinere Deformationen als der Ausströmungsbereich. Dieses Verhalten ist in Abbildung 6.27 zu verschiedenen Zeitpunkten während der Aufheizphase entlang der gezeigten Randkurve der Unterschale dargestellt. Die Konturdarstellung im linken Teil der Abbildung zeigt die Verschiebungsfunktion entlang der Kante zum Start der Aufheizphase nach dem isothermen Abkühlvorgang.

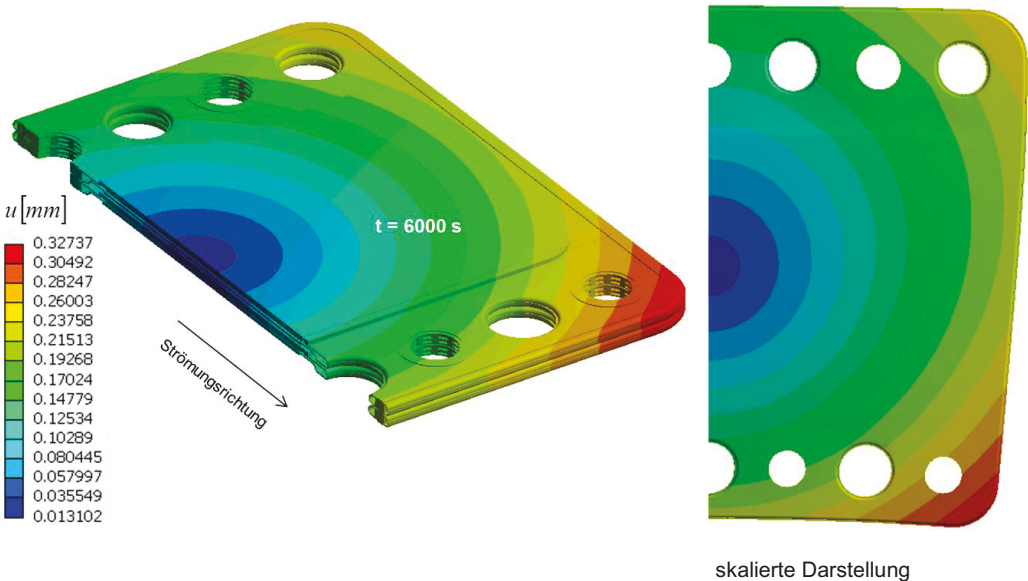


Abbildung 6.26: Verschiebungsfeld in den Kassetten am Ende der Aufheizphase

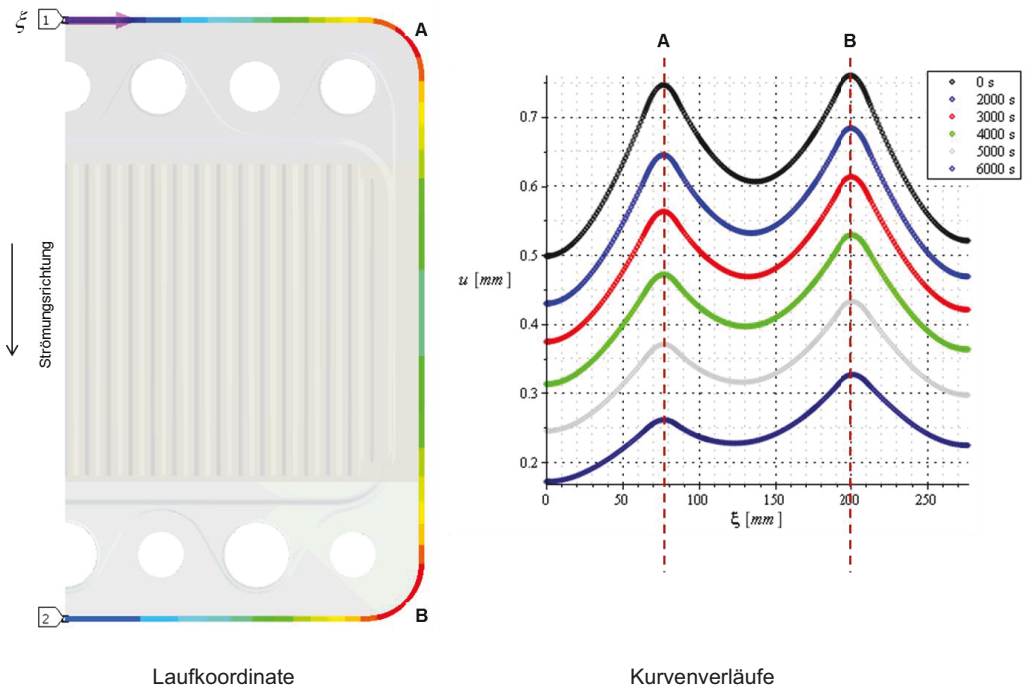


Abbildung 6.27: Verschiebungsverlauf entlang ξ -Linie während der Aufheizphase (0 s – 6000 s)

Der rechte Teil der Abbildung 6.27 verdeutlicht anhand der Verläufe der Verschiebungsfunktion entlang der Kante, wie die Verschiebungswerte in den Bereichen A und B auseinandergehen und am Ende der Aufheizphase der maximale Wert der Verschiebungsdifferenz vorliegt. Die Darstellung verdeutlicht, wie die Deformation mit der Zeit an der Stelle des lokalen Maximums A schneller kleiner wird als an der Stelle des lokalen Maximums B. Durch das Auftreten größerer Deformationen im Bereich B verschwindet das beobachtete kreissymmetrische Profil der Verschiebung im Laufe der Aufheizphase.

6.3 Betriebsphase

6.3.1 gekoppelte stationäre fluiddynamische Analyse

Für die Untersuchung der Betriebsphase werden die fluiddynamischen Randbedingungen geändert, indem auf der Anodenseite neben dem Wasserstoff zur Erhöhung des partiellen Drucks Argon eingesetzt wird. Während dieser Phase gelten für die Massenströme die Angaben in der Tabelle 6.1

Tabelle 6.1: Massenströme während der Betriebsphase für den 2-Zeller-Stack

Gas	\dot{m}
Luft	0,02424 g/s/inlet
Wasserstoff	0,0007492 g/s/inlet
Argon	0,01487 g/s/inlet

Die Wärmeproduktion aus dem elektrochemischen Prozess, die den Stack erwärmt und von den strömenden Gasen aufgenommen wird, ist durch Wärmeflüsse aus den Oberflächen der Zellen berücksichtigt. Basierend auf den Parametern der ablaufenden elektrochemischen Vorgänge werden die entsprechenden Wärmeflüsse zu 1 W/Ebene berechnet. Das ermittelte Temperaturfeld und der Betrag des Temperaturgradienten im Stack während der Betriebsphase sind in Abbildung 6.28 dargestellt.

Wie die Abbildung zeigt, nimmt die Stack-Temperatur in Strömungsrichtung geringfügig zu, wobei aufgrund der elektrochemischen Prozesse Hotspots in den Ausströmungsbereichen des Stacks entstehen. Charakteristisch für das Temperaturprofil in dieser Phase sind geringe Ungleichmäßigkeiten in der Verteilung sowie ein geringer Unterschied zwischen höchster und niedrigster Temperatur im Vergleich zur Temperaturverteilung in der Aufheizphase. Ferner nimmt der Betrag des Temperaturgradienten seinen höchsten Wert im Eintrittsbereich der Gase an. Ein entsprechendes Verhalten wurde bei ähnlich aufgebauten Stacks sowohl bei der Simulationsberechnung als auch bei experimentellen Messungen beobachtet [92, 93].

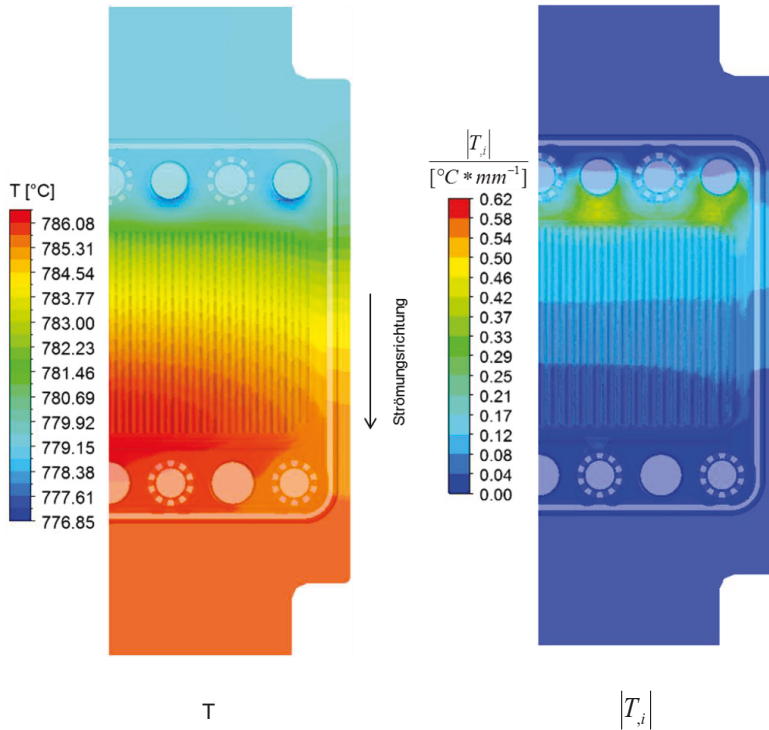


Abbildung 6.28: Verteilung der Temperatur und des Betrages des Temperaturgradienten im Stack während der Betriebsphase

6.3.2 Thermomechanische Analyse

6.3.2.1 Thermische Dehnungen

Während der Betriebsphase herrschen im Stack die höchsten Temperaturen, die über die Zeit erreicht werden. Aus diesem Grund nehmen die thermischen Dehnungen während dieser Phase betragsmäßig ihre kleinsten Werte an, da der Abstand zur spannungsfreien Referenztemperatur abnimmt. Räumlich betrachtet liegen die höchsten thermischen Dehnungen im Zellbereich, wo Wärme produziert wird und dadurch die Temperatur steigt.

Während die thermischen Dehnungen am Ende der Aufheizphase im Intervall

$$0,00202 \leq |\varepsilon^{th}| \leq 0,00388 \quad (6.9)$$

liegen, sind die entsprechenden Werte der Betriebsphase im Bereich

$$0,000160 \leq |\varepsilon^{th}| \leq 0,000272, \quad (6.10)$$

wie in Abbildung 6.29 anhand der Verteilung der thermischen Dehnung in den Kassetten ersichtlich ist. Ferner nehmen die thermischen Dehnungen in Strömungsrichtung betragsmäßig ab, da die Temperaturen in diese Richtung zunehmen.

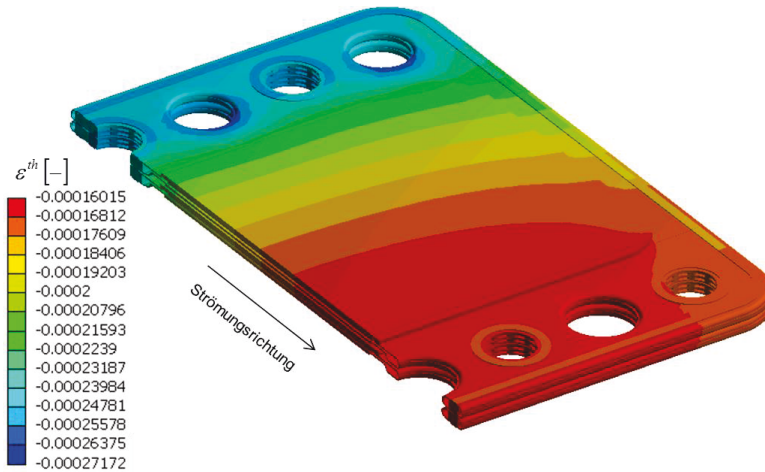


Abbildung 6.29: Verteilung der thermischen Dehnung in den Kassetten während der Betriebsphase

6.3.2.2 Mechanische Verzerrungen

Wie bereits erwähnt, treten die höchsten Temperaturgradienten im Einströmungsbereich der Gase auf. Zusammen mit der Existenz eines Materialgradienten aufgrund unterschiedlicher Materialeigenschaften sind in diesem Bereich die maximalen mechanischen Dehnungen zu erwarten. Dennoch fallen auch die mechanischen Verzerrungen klein aus, da sie hauptsächlich aufgrund der Deformationsbehinderungen entstehen, die infolge geringer thermischer Dehnungen zustande kommen. Die Verteilung der mechanischen Verzerrungen in den Kassetten ist in Abbildung 6.30 dargestellt. Zum Vergleich mit der Aufheizphase treten die maximalen Werte hier im Glaskörper auf und betragen ungefähr 18% der Höchstwerte, die am Ende der Aufheizphase erreicht werden.

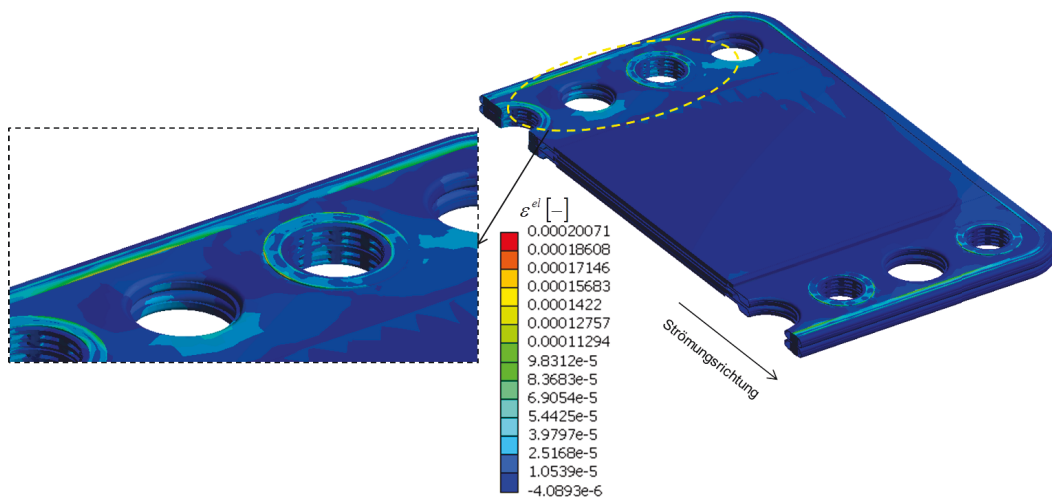


Abbildung 6.30: Verteilung der mechanischen Verzerrung in den Kassetten

6.3.2.3 Spannungsverteilung

Aufgrund der Verknüpfung der mechanischen Verzerrungen mit den Spannungen über das Materialgesetz sind die in dieser Prozessphase verursachten Spannungen entsprechend den mechanischen Verzerrungen auch niedrig und treten im Glaskörper auf, wie in Abbildung 6.31 dargestellt. Der Vergleich mit der Aufheizphase zeigt, dass die während der Betriebsphase erreichten maximalen Spannungswerte lediglich 20% der Spannungen am Ende der Aufheizphase betragen.

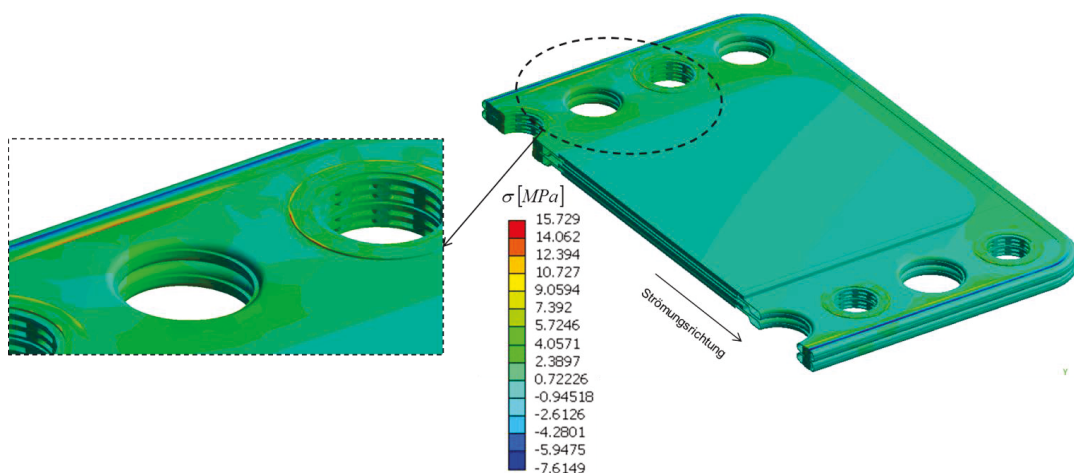


Abbildung 6.31: Spannungsverteilung in den Kassetten

6.3.2.4 Verschiebungsfeld

Das Verschiebungsfeld hat das charakteristische Profil, das während der Aufheizphase beobachtet wird, wie in Abbildung 6.32 dargestellt. Im Gegensatz zur Aufheizphase sind die Verschiebungen insgesamt viel geringer, da die im Stack auftretenden Temperaturen höher sind und folglich die Differenz zur spannungsfreien Referenztemperatur kleiner ist. Aus dem gleichen Grund sind die Deformationen in der oberen Ecke am größten, da die Temperatur in Strömungsrichtung zunimmt. Durch die inhomogene Verteilung der Verschiebung stellen die Isolinen verzerrte Kreise dar, die nicht mehr konzentrisch sind. Durch die Skalierung der Deformation wird die Verzerrung im oberen Teil des Bildes deutlicher.

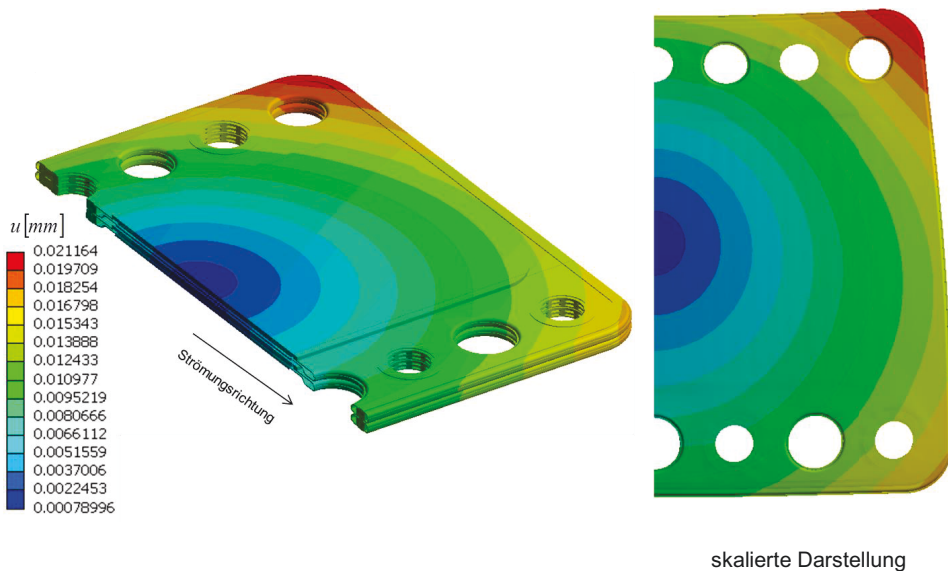


Abbildung 6.32: Verschiebungsfeld in den Kassetten

Die Verteilung der einzelnen Komponenten des Verschiebungsvektors ist in Abbildung 6.33 dargestellt. Daraus ist deutlich zu erkennen, wie gering die Deformationen sind. Insbesondere in z-Richtung hat die Verschiebungskomponente einen maximalen Betrag von 2,41 μm .

Auch während dieser Prozessphase treten große Verschiebungen an den Ecken des Stack auf, wobei die oberen Ecken die maximalen Verschiebungen erfahren. Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 6.34 den Verlauf der Verschiebung entlang der Unterschalenkante. Ähnlich der Aufheizphase besitzt die Kurve zwei lokale Maxima, die den Verschiebungen der Eckpunkte entsprechen. Ferner zeigt der Vergleich mit dem Kurvenverlauf am Ende der Aufheizphase, dass die Verschiebung am ersten Eckpunkt höher liegt als am zweiten, wie in Abbildung 6.34 dargestellt.

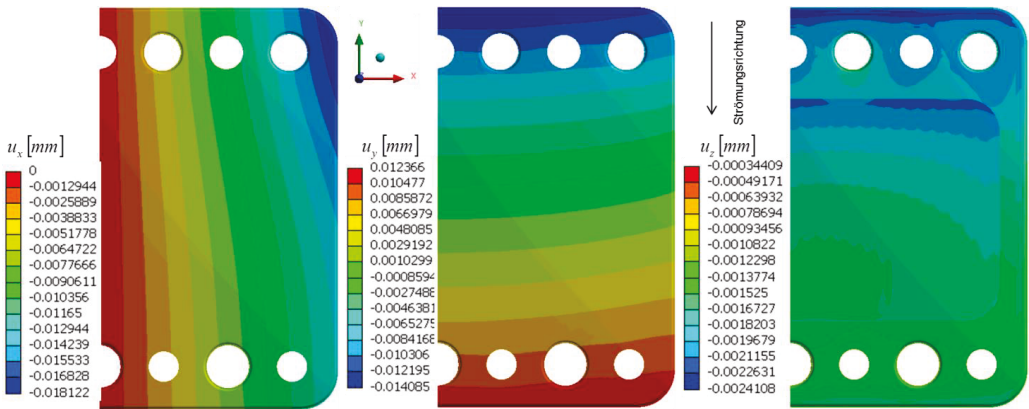


Abbildung 6.33: Verschiebungskomponenten

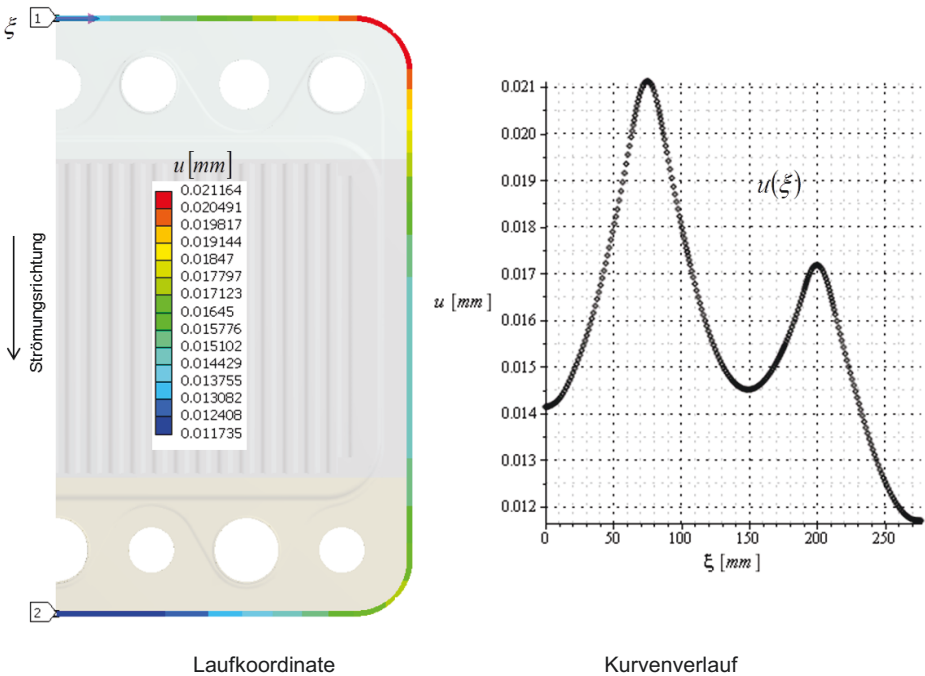


Abbildung 6.34: Verschiebungsverlauf entlang ξ während der Betriebsphase

Zum Vergleich mit dem Zustand am Ende der Aufheizphase werden die Verschiebungsfunktionen entlang der Unterschalenkante betrachtet. Für beide Verschiebungsfunktionen sind die entsprechenden Kurvenverläufe in Abbildung 6.35 nebeneinander gezeigt. Die Darstellung verdeutlicht die unterschiedlichen Verläufe sowie die Größenordnung der erreichten Verschiebungen während beider Prozessphasen. Am Ende der Aufheizphase wird eine maximale Verschiebung von ungefähr 0.33 mm erreicht. Dagegen liegt der entsprechende Wert

der maximalen Verschiebung während der Betriebsphase bei 0,021 mm, was eine Reduzierung auf ungefähr 6,46% bedeutet.

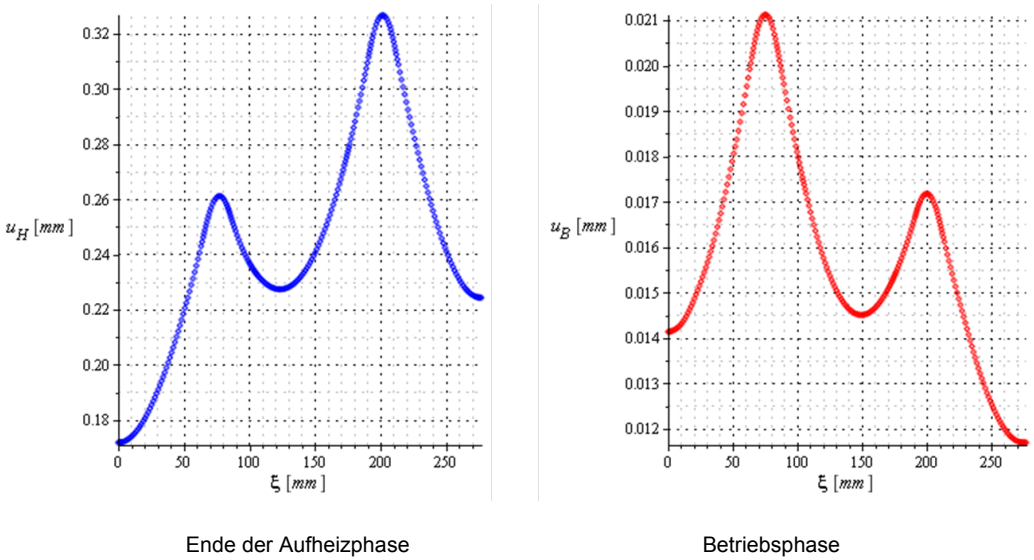


Abbildung 6.35: Verschiebungsverlauf entlang ξ während der Aufheiz- und Betriebsphasen

Das Verhältnis der Verschiebungen während der Aufheizphase und der Betriebsphase wird deutlicher in Abbildung 6.36, in der die räumliche Darstellung der Verschiebungskurven gemäß

$$u = u(\xi, n) \quad (6.11)$$

gezeigt wird. Dabei bezeichnet n den Lastschritt, der jeweils einem Zeitpunkt des Prozesses entspricht. Die Lastschritte 17 bis 30 kennzeichnen die Aufheizphase, während der Lastschritt 31 den Betriebszustand darstellt. Die nicht gezeigten Lastschritte 1 bis 16 beschreiben den isothermen Abkühlvorgang des Stacks nach dem Zusammenfügen der einzelnen Komponenten. Die Kurvenschar im Bereich $17 \leq n \leq 30$ veranschaulicht die Abnahme der Verschiebung im Laufe der Aufheizphase, worauf im Abschnitt 6.2.2.5 eingegangen wurde.

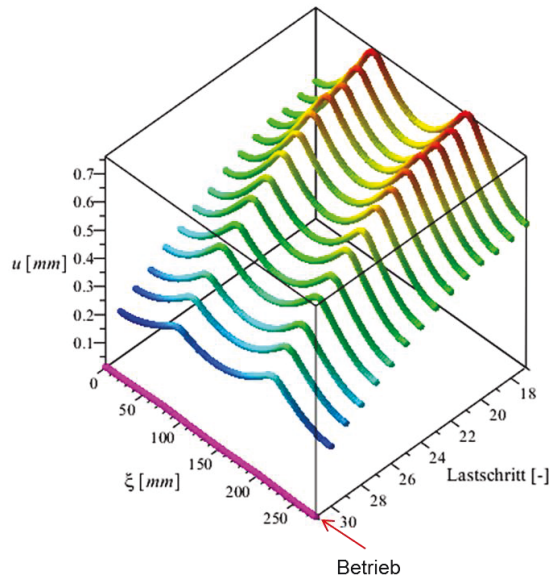


Abbildung 6.36: Verschiebungsverlauf entlang ξ während der Aufheiz- und Betriebsphasen bei verschiedenen Lastschritten

6.4 Abkühlphase

6.4.1 gekoppelte transiente fluiddynamische Analyse

Während der Abkühlphase fallen die Temperaturen der strömenden Gase gemäß der in Abbildung 6.37 dargestellten exponentiellen Kurve ab. Die Massenströme werden auf den Betrag von 5 NL/min/Ebene sowohl anodenseitig als auch kathodenseitig eingestellt.

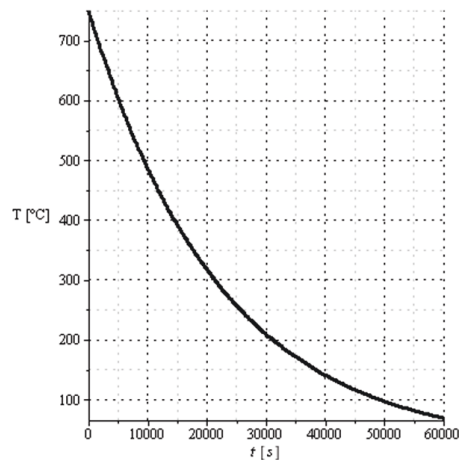


Abbildung 6.37: Abkühlkurve (Temperatur der einströmenden Gase)

Die ermittelten Stack-Temperaturen sowie die Betragsprofile der entsprechenden Temperaturgradienten sind zu verschiedenen Zeitpunkten der Abkühlphase in den Abbildungen (6.38 – 6.41) dargestellt. Bei dieser Darstellung werden ebenfalls angepasste Skalen verwendet, weshalb die Bilder einen ähnlichen Charakter der Temperaturprofile über die Zeit zeigen.

Die Temperaturfelder sind durch steigende Temperaturen in Strömungsrichtung sowie kleine Beträge der Komponenten des Temperaturgradienten gekennzeichnet. Während dieser Prozessphase wird Wärme mit den strömenden Gasen aus dem Festkörper abgeführt, weshalb die Stack-Temperaturen abnehmen. Ferner zeigt das Temperaturfeld mit der Zeit ein homogeneres Bild, sodass die Differenz zwischen höchster und niedrigster Temperatur im Stack geringer wird. Diese Temperaturdifferenz ist maßgeblich für die Größe der hervorgerufenen thermischen Spannungen, die im Laufe des Abkühlvorgangs infolge der geringen Inhomogenität der Temperaturverteilung erwartungsgemäß abnehmen. Die Temperaturgradienten werden im Laufe dieser Prozessphase betragsmäßig kleiner, wobei die maximalen Werte im Einstromungsbereich der Gase auftreten, da die abkühlenden Gase die Wärme zunächst aus diesem Bereich abführen und die Fähigkeit der Wärmeaufnahme in Strömungsrichtung geringer wird.

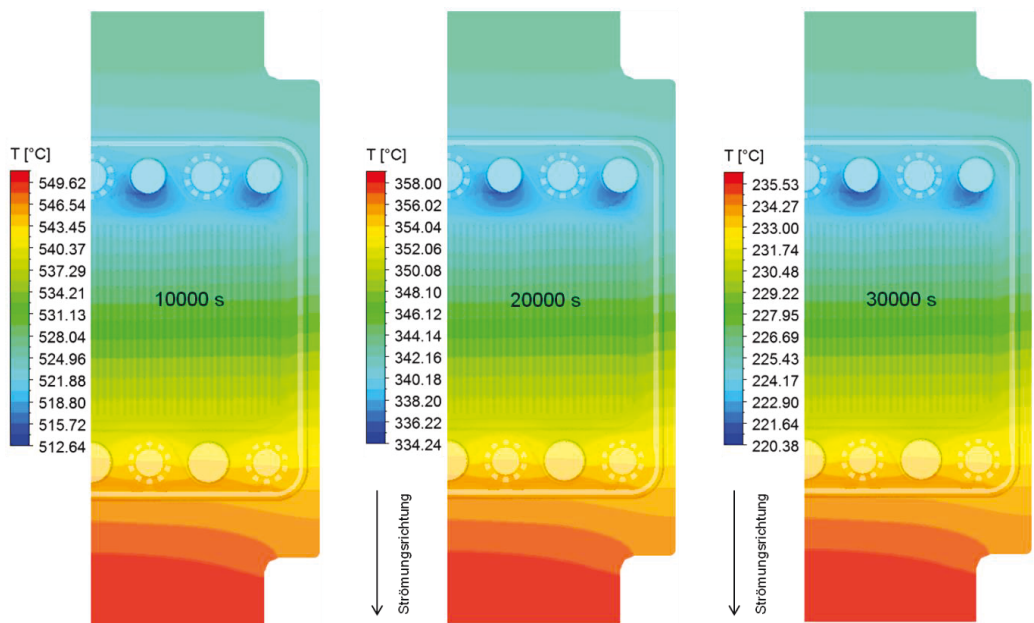


Abbildung 6.38: Temperaturverteilung im Stack während der Abkühlphase 10000 s, 20000 s und 30000 s nach dem Start der Abkühlung

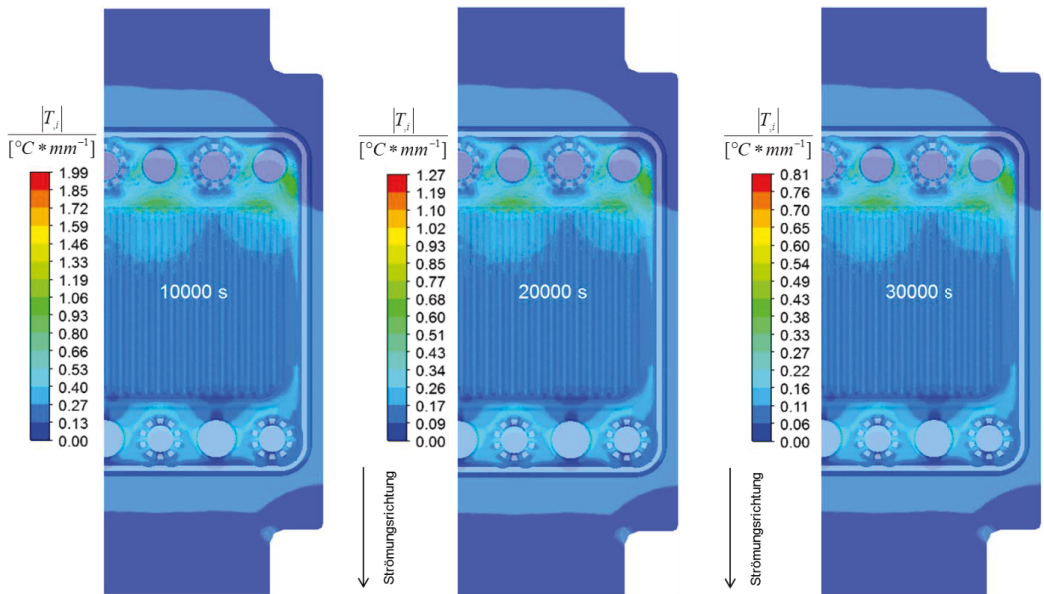


Abbildung 6.39: Betrag des Temperaturgradienten während der Abkühlphase
10000 s, 20000 s und 30000 s nach dem Start der Abkühlung

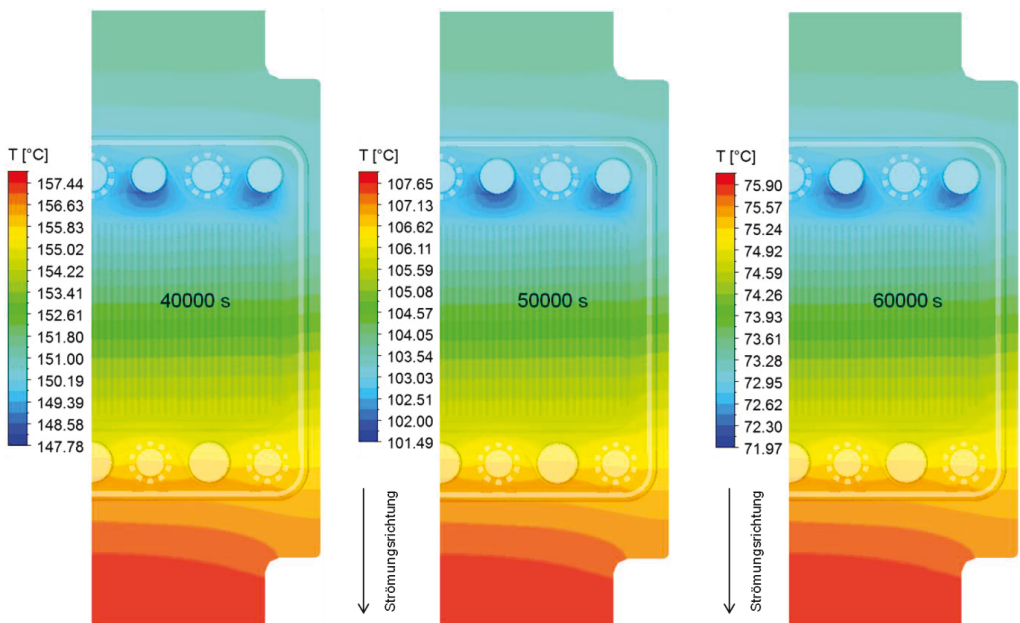


Abbildung 6.40: Temperaturverteilung im Stack während der Abkühlphase
40000 s, 50000 s und 60000 s nach dem Start der Abkühlung

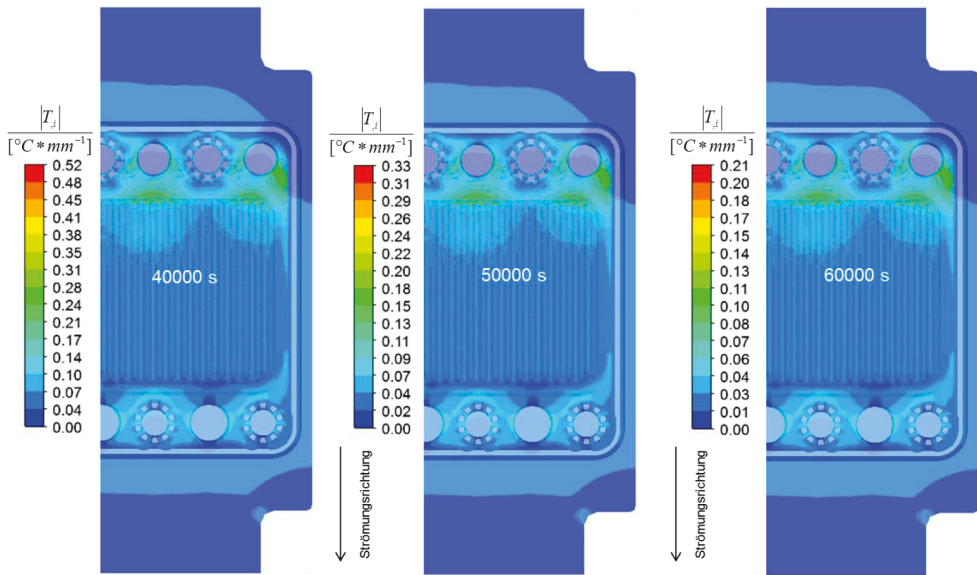


Abbildung 6.41: Betrag des Temperaturgradienten, 40000 s, 50000 s und 60000 s nach dem Start der Abkühlung

Die zeitlichen Verläufe der im Stack auftretenden maximalen und minimalen Temperaturen sind in Abbildung 6.42 dargestellt. Im Gegensatz zur Aufheizphase liegen die Kurven insbesondere am Ende der Abkühlphase nahe beieinander, da die Abkühlgeschwindigkeit durch die zeitliche Abnahme der Gastemperatur mit der Zeit abfällt. Dies bedeutet, dass im Laufe der Abkühlphase innerhalb gleicher Zeitintervalle am Anfang größere Temperaturänderungen auftreten als am Ende des Abkühlens. Deshalb verringert sich auch der Unterschied zwischen den Kurven.

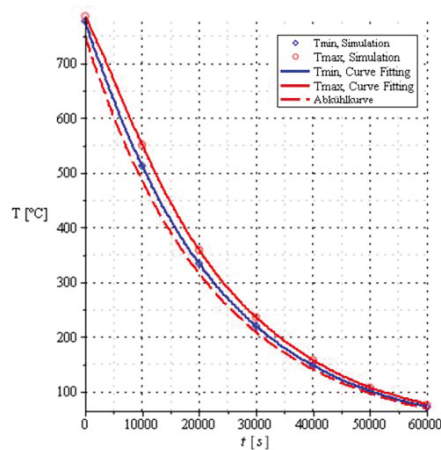


Abbildung 6.42: Zeit-Verläufe der Temperaturen

Wie bereits erwähnt, haben der Unterschied zwischen maximaler und minimaler Festkörpertemperatur sowie der Temperaturgradient große Auswirkungen auf die im Stack auftretenden thermischen Spannungen. Die zeitlichen Verläufe beider Größen sind in Abbildung 6.43 dargestellt. Wie bei der Betrachtung der Aufheizphase erläutert, haben die Kurven ähnliche Verläufe. Auch in dieser Prozessphase wird die Ähnlichkeit noch deutlicher, wenn das zeitliche Verhalten der bereits eingeführten normierten Größen betrachtet wird, wie Abbildung 6.44 zeigt.

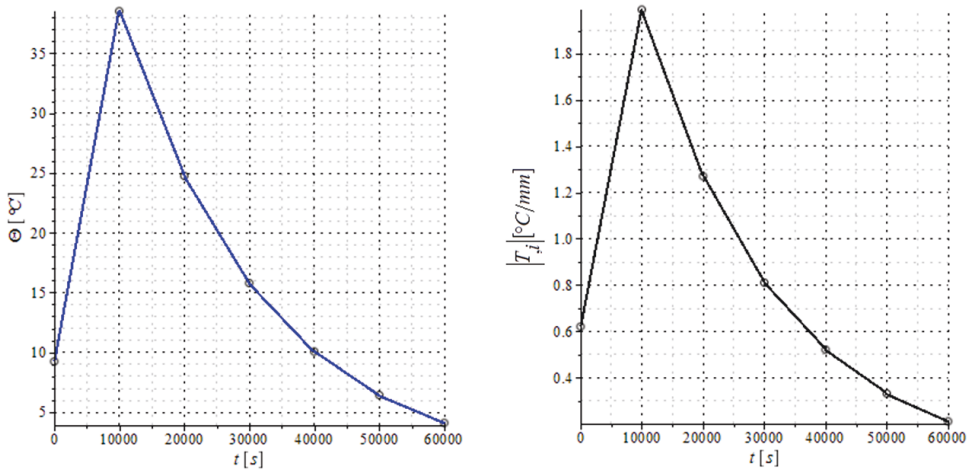


Abbildung 6.43: Zeit-Verläufe von Θ und $|T_{,i}|$

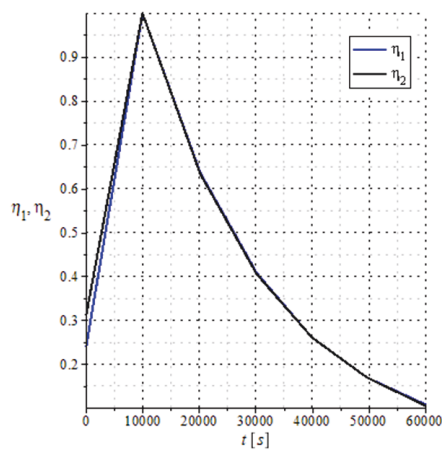


Abbildung 6.44: Zeit-Verlauf von η_1 und η_2

6.4.2 Thermomechanische Analyse

6.4.2.1 Thermische Dehnungen

Basierend auf den aus der numerischen fluiddynamischen Berechnung ermittelten thermischen Lasten kann nun das thermomechanische Verhalten des Stacks während der Abkühlphase untersucht werden. Zu diesem Zweck werden zunächst die verursachten thermischen Dehnungen betrachtet. In Abbildung 6.45 sind diese für die Zeiten 10000 s, 30000 s und 60000 s nach dem Start der Abkühlphase dargestellt.

Erwartungsgemäß steigen die thermischen Dehnungen mit der Zeit, da die Stack-Temperatur sinkt und somit der Abstand zur spannungsfreien Referenztemperatur zunimmt. Durch die gleiche Begründung erklärt sich die räumlich auftretende betragsmäßige Abnahme der thermischen Dehnungen in Strömungsrichtung im Festkörper des Stacks. Aufgrund der niedrigen Temperaturgradienten ist die räumliche Variation der thermischen Dehnung innerhalb des Stacks sehr klein.

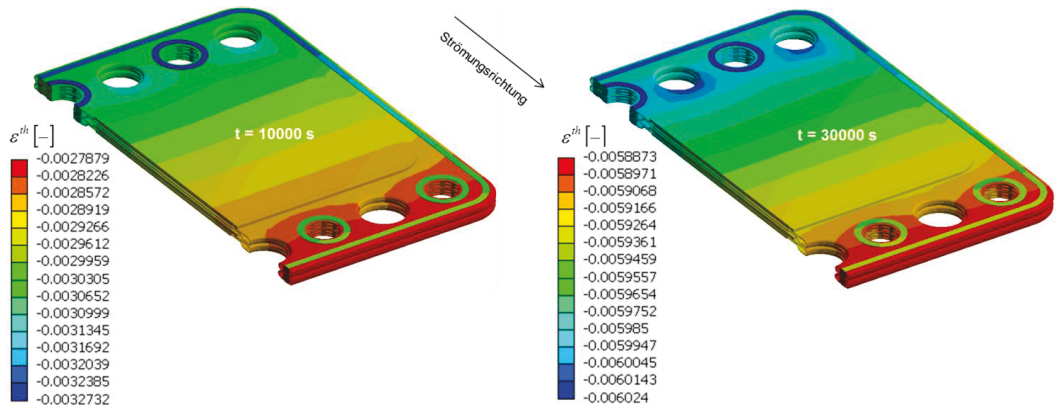


Abbildung 6.45: Verteilung der thermischen Dehnung während der Abkühlphase 10000 s und 30000 s nach dem Start der Abkühlung

Dies ist besonders am Ende der Abkühlphase deutlich zu erkennen, wo lediglich die Inhomogenität des Materials bedingt durch die unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten für das räumliche Profil der thermischen Dehnung verantwortlich ist, wie Abbildung 6.46 zeigt.

Um eine bessere Auflösung nach den lokalen thermischen Dehnungen zu erreichen, werden in Abbildung 6.47 die Bereiche der verschiedenen Stack-Materialien, Stahl und Glas, getrennt dargestellt, wobei unterschiedliche Skalen verwendet werden. Betragsmäßig liegen die Werte der thermischen Dehnungen in den jeweiligen Materialien in den Intervallen

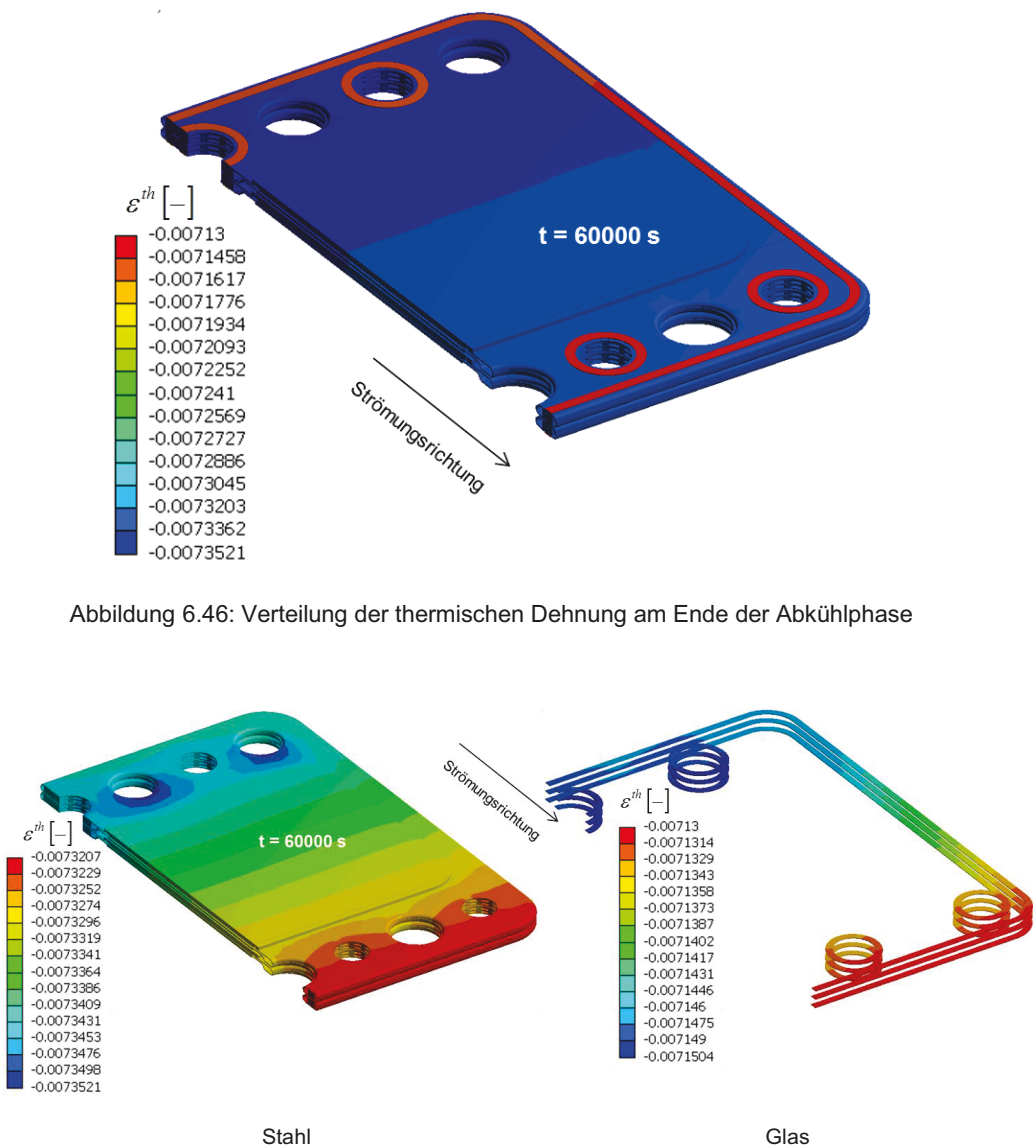
$$0,7321\% \leq |\epsilon_{Stahl}^{th}| \leq 0,7352\% \quad (6.12)$$

bzw.

$$0,7130\% \leq \left| \varepsilon_{Glas}^{th} \right| \leq 0,7150\%$$

(6.13)

Die geringen Unterschiede der thermischen Dehnungen im Stahl und im Glas lassen sich auf den geringfügig höheren Wärmeausdehnungskoeffizienten des Stahls im herrschenden Temperaturbereich zurückführen.



6.4.2.2 Mechanische Verzerrungen

Die Behinderung der Deformationen, die aufgrund der thermischen Dehnungen entstehen, führt zu mechanischen Verzerrungen, deren Höchstwerte in der Glasfügung auftreten, wie Abbildung 6.48 zeigt. Die ermittelten Werte liegen zunächst höher als in der Betriebsphase, da die Temperaturverteilung ungleichmäßig wird und höhere lokale Temperaturgradienten insbesondere im Einströmungsbereich der heißen Gase existieren. Zu späteren Zeitpunkten im Laufe des Abkühlvorgangs wird die Unregelmäßigkeit des Temperaturfeldes geringer, weshalb die mechanischen Dehnungen anschließend abnehmen und die Gradienten in ihrer räumlichen Verteilung hauptsächlich durch die Inhomogenität des Materials bedingt werden.

In der Darstellung ist das Profil der mechanischen Dehnung 10000 s nach dem Start und am Ende der Abkühlphase zu sehen. Aus der räumlichen Verteilung lässt sich erkennen, dass zunächst im Einströmungsbereich geringfügig höhere Dehnungswerte vorliegen. Dieses charakteristische Bild ändert sich langsam während dieser Prozessphase, bis schließlich der Einfluss der unterschiedlichen thermomechanischen Materialeigenschaften überwiegt, so dass die beiden Materialbereiche deutlich zu unterscheiden sind und im Allgemeinen eine gleichmäßige Verteilung der mechanischen Dehnung vorliegt, wie im rechten Teil der Abbildung 6.48 dargestellt.

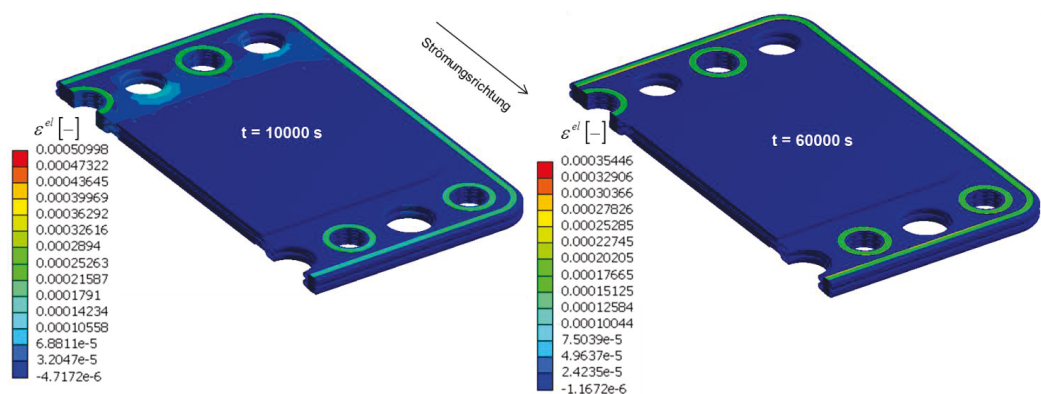


Abbildung 6.48: Verteilung der mechanischen Dehnung in den Kassetten 10000 s und 60000 s nach dem Start der Abkühlung

6.4.2.3 Spannungsverteilung

Auch in dieser Prozessphase überlagern sich die Auswirkungen der Einflussparameter Materialinhomogenität und Temperaturgradienten bei der Behinderung der Verformung des Stacks, was zu thermischen Spannungen führt. Wie Abbildungen 6.49 und 6.50 zeigen, sind die maximalen Spannungsniveaus niedriger als bei der Aufheizphase, was auf die geringere Ungleichmäßigkeit in der Temperaturverteilung zurückzuführen ist. In den Abbildungen 6.49 und 6.50 sind die Spannungsverteilungen zu den Zeitpunkten 10000 s, 30000 s, 50000 s und 60000 s nach dem Start der Abkühlphase dargestellt. Die Abbildungen zeigen den Bereich, wo die maximalen Werte der Spannungen im Stack erscheinen. Ferner treten geringfügig höhere Spannungen in der Glasfügung als im Stahl auf. Der Stahlkörper besitzt aufgrund seiner Geometrie und Materialeigenschaften eine höhere Steifigkeit, weshalb das Verfor-

128

mungsverhalten der Struktur vom Stahlkörper dominiert wird. Die Spannungen in der Glasfü-
gung werden durch die Behinderung der thermischen Deformationen verursacht.

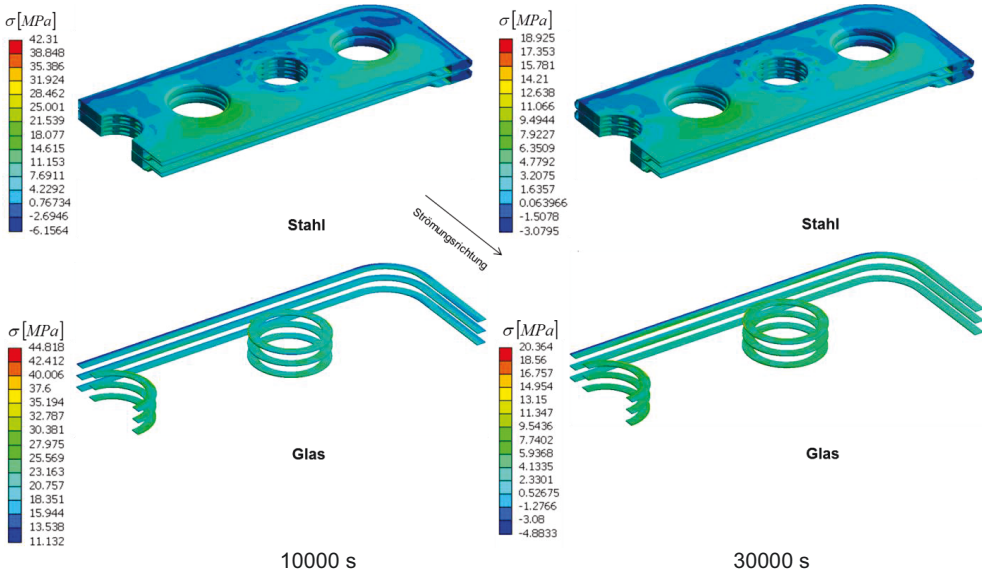


Abbildung 6.49: Spannungsverteilung im Einströmungsbereich

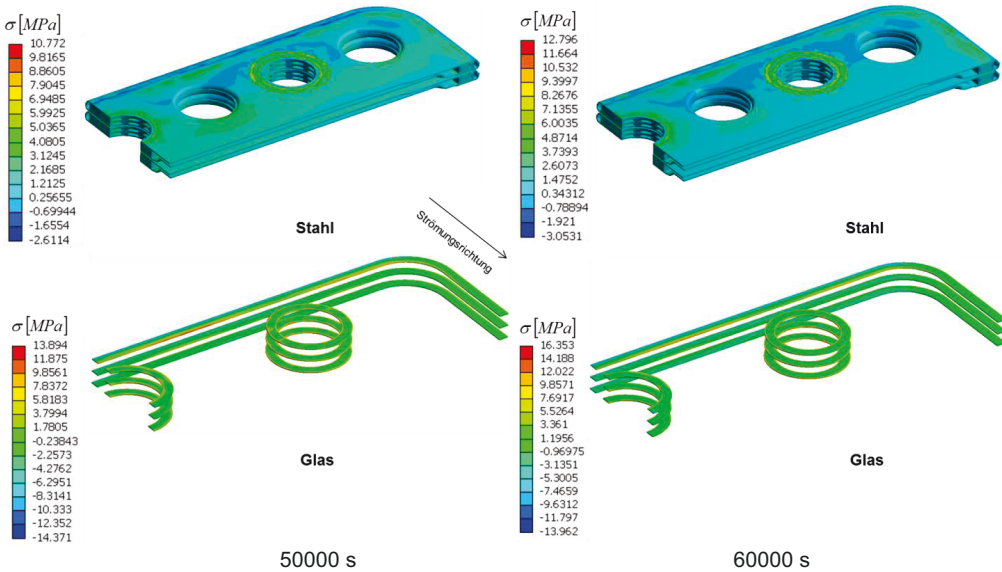


Abbildung 6.50: Spannungsverteilung im Einströmungsbereich

6.4.2.4 Verschiebungsfeld

Auch während der Abkühlphase besitzt das Verschiebungsfeld das charakteristische Profil mit der kreissymmetrischen Verteilung, wie in Abbildung 6.51 zu sehen ist. Die Darstellung zeigt das Verschiebungsprofil am Ende der Abkühlphase, wo die Verschiebungen wieder zunehmen. Zu diesem Zeitpunkt ist der Unterschied zur spannungsfreien Referenztemperatur am größten, da die Temperaturen im Stack abnehmen. Demgemäß schrumpft die Struktur zusammen, was zu größeren Verschiebungen führt, die in den Eckbereichen ihre maximalen Werte annehmen.

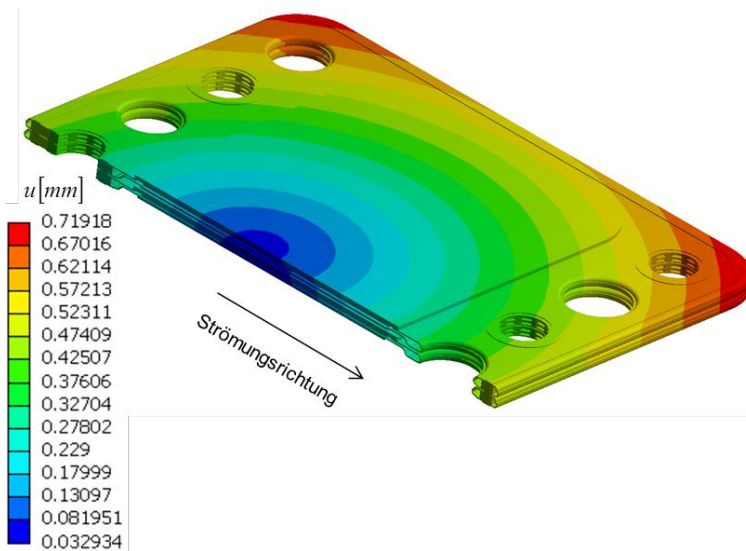


Abbildung 6.51: Verschiebungsfeld am Ende der Abkühlphase

Der zeitliche Verlauf der maximalen Verschiebungen während der Abkühlphase ist in Abbildung 6.52 dargestellt, wo das monoton steigende Verhalten der Kurve deutlich zu sehen ist. Am Ende des Abkühlvorgangs erreichen die Verschiebungen ihre Höchstwerte, die in der Größenordnung von 0.72 mm sind und in den Eckbereichen auftreten.

Aufgrund der abfallenden Temperaturen liegen die Verschiebungswerte wesentlich höher als in der Betriebsphase. Zur weiteren Veranschaulichung zeigt Abbildung 6.53 die Verläufe der Verschiebungen entlang der Unterschalenkante, die durch die Laufkoordinate ξ beschrieben wird.

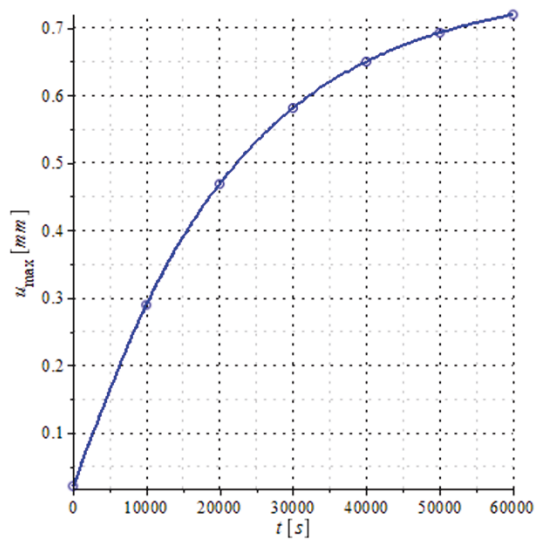


Abbildung 6.52: Zeitlicher Verlauf der maximalen Verschiebung

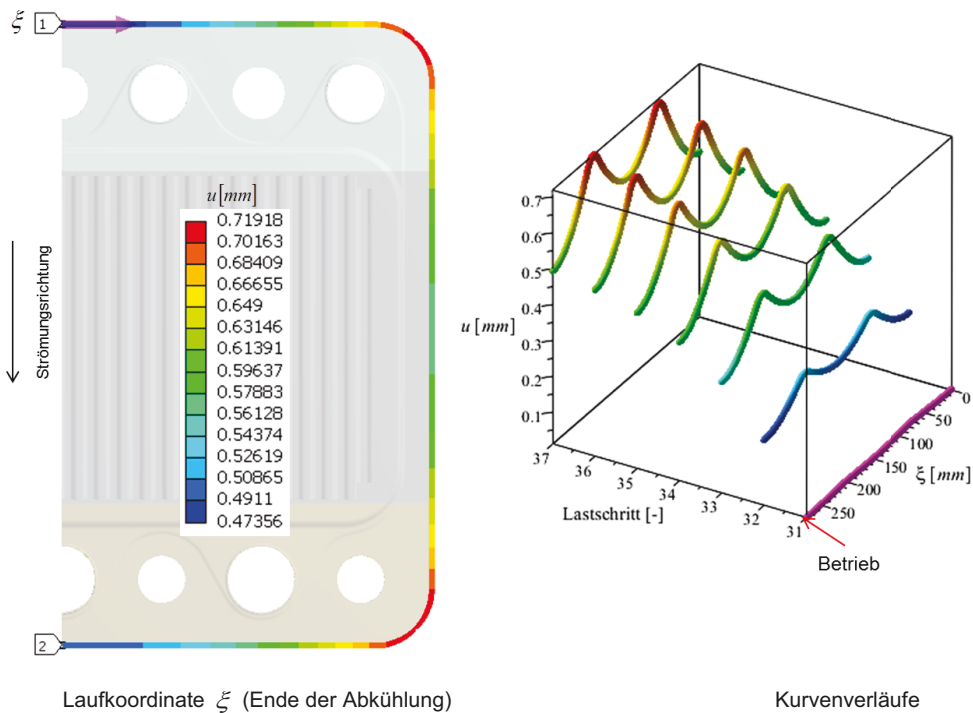


Abbildung 6.53: Verschiebungsverlauf entlang ξ während der Abkühlphase bei verschiedenen Lastschritten

Die Kurven besitzen jeweils zwei lokale Maxima, die den Verschiebungen der Eckpunkte entsprechen, wobei die Verschiebung am unteren Eckpunkt geringfügig höher liegt. Auch in dieser Darstellung ist der Unterschied der Kurvenverläufe während der Abkühlphase zur Betriebsphase deutlich zu erkennen.

Die Konturdarstellung der Verschiebungskomponenten in den Raumrichtungen zeigt gemäß Abbildung 6.54 eine gleichmäßige Verteilung der entsprechenden Komponenten, was als Folge der homogenen Verteilung der Temperatur zu betrachten ist. Ähnlich wie in den anderen vorher betrachteten Prozessphasen ist der Betrag der Verschiebungskomponente in z-Richtung geringer als in den beiden anderen Raumrichtungen. Die Verschiebungskomponente senkrecht zur Stack-Ebene beeinflusst das Kontaktierungsverhalten im Stack.

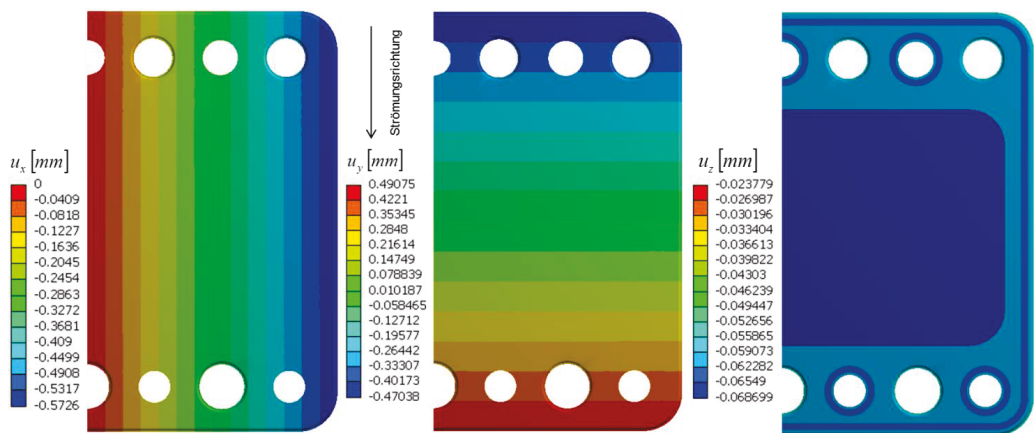


Abbildung 6.54: Verschiebungsfeld am Ende der Abkühlphase

6.5 Zusammenfassung der thermomechanischen Analyse

Im Folgenden werden die im Stack auftretenden Spannungen über einen Operationszyklus bestehend aus den 4 Prozessphasen:

- Abkühlen nach dem Zusammenfügen
- Aufheizphase
- Betriebsphase
- Abkühlphase

zusammengefasst. Anschließend werden die in der Zelle auftretenden Verschiebungen untersucht. Mit Hilfe der strukturmekanischen Analyse wird das entsprechende Spannungsfeld zu dem jeweiligen Lastschritt ermittelt. In Abbildung 6.55 sind die Verläufe der maximalen Werte der Spannungen im Stahl sowie im Glas über die Lastschritte aufgetragen. Beim isothermen Abkühlen nach dem Zusammenfügen der Stack-Komponenten entsprechen die Lastschritte Temperaturwerten, die entlang der horizontalen Achse angegeben sind. Dagegen stellen die Lastschritte in den darauffolgenden Prozessphasen Aufheizen und inhomogenes Abkühlen dar.

genes Abkühlen ungleichmäßig verteilte Temperaturprofile dar, weshalb keine Temperaturwerte während dieser Phasen angegeben sind.

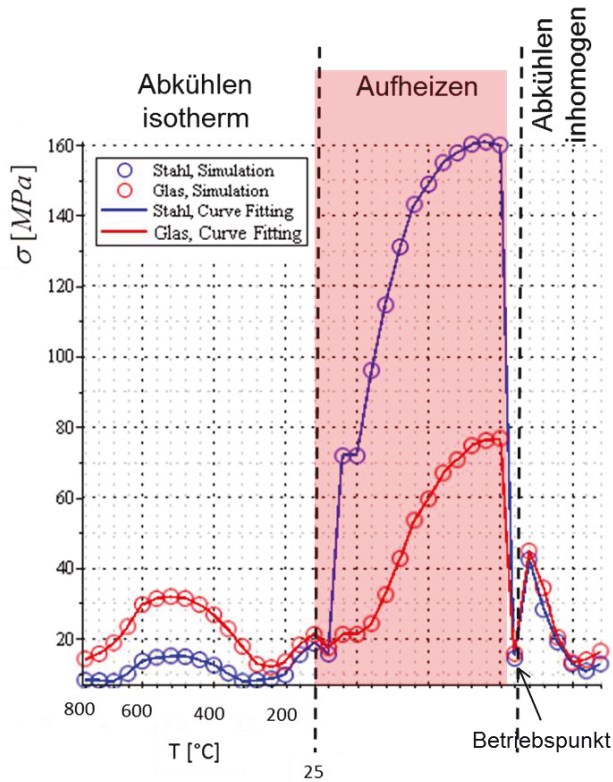


Abbildung 6.55: Verlauf der Spannung über die thermische Last während eines Prozesszyklus

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (5.34) und (5.35) sind die Spannungen im Stack aufgrund der homogenen Verteilung des Temperaturfeldes während der ersten Abkühlphase niedrig und werden hauptsächlich durch die unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten von Stahl und Glas verursacht. Dagegen führen die Temperaturgradienten im Stack beim Aufheizen zum Anstieg der Spannungen sowohl im Stahl als auch im Glas, wobei die maximalen Werte der Spannung am Ende der Aufheizzeit auftreten. Wie bereits ermittelt, herrscht während der Betriebsphase im Stack eine thermische Last, die durch niedrige Temperaturgradienten gekennzeichnet ist. Dem entsprechend fallen die Spannungen in den Komponenten des Stacks ab. Anschließend entstehen am Anfang der Abkühlphase höhere Temperaturgradienten, die während dieser Prozessphase abnehmen. Dies erklärt den sprunghaften Anstieg der Spannungen unmittelbar nach der Betriebsphase, die im Laufe des Abkühlvorgangs kleiner werden. Anhand der ermittelten Ergebnisse ist deutlich zu erkennen, dass der Aufheizprozess zu den höchsten thermischen Spannungen im SOFC-Stack führt. Diese sind beispielsweise in der Glasfügung um den Faktor 4,75 höher als die entsprechen-

den Spannungen, die während der Betriebsphase auftreten. Diese Tatsache rechtfertigt die Verwendung der Wärmequellen, um die durch elektrochemische Vorgänge erzeugte Wärme zu modellieren und somit einen unnötigen Rechenaufwand zu vermeiden, wie im Abschnitt 2.3.2 erläutert wurde.

Da das Verformungsverhalten der Zelle für die Kontaktierung von grundlegender Bedeutung ist, wird die Verschiebung entlang der dargestellten Zellenkannte betrachtet, die mit Hilfe der Laufkoordinate ξ beschrieben wird. Abbildung 6.56 zeigt die Verläufe der Verschiebung während des Prozesszyklus entlang der Zellenkannte, wobei in der Konturdarstellung der Zustand am Ende der Abkühlphase zu sehen ist. In der räumlichen Kurvendarstellung wird der Lastschritt als Kurvenparameter definiert, wobei die Lastschritte 17 bis 30 im rechten Teil der Abbildung die Verschiebung während der Aufheizphase beschreiben. Der darauffolgende Lastschritt 31 beschreibt die Verschiebung während der Betriebsphase. Entsprechend den Lastschritten 32 bis 37 geben die Kurven im linken Teil der Abbildung die Verschiebungen während der Abkühlphase wieder.

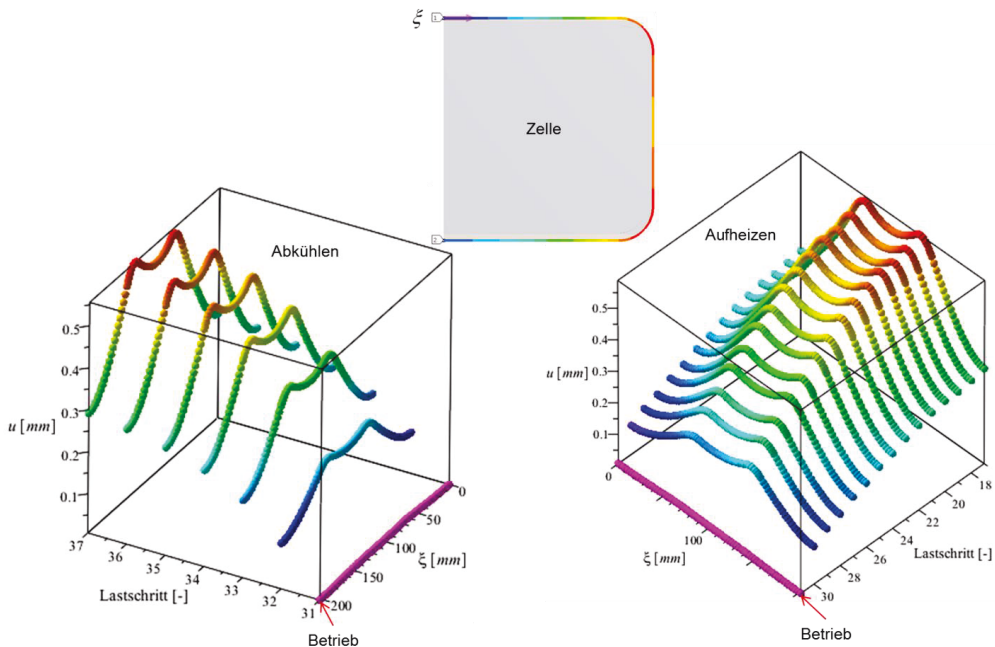


Abbildung 6.56: Verschiebungsverlauf entlang ξ während des Prozesszyklus bei verschiedenen Lastschritten

Wie bereits in den vorigen Abschnitten dieses Kapitels beschrieben, treten die maximalen Verschiebungen in den Eckbereichen auf und erreichen ihre Höchstwerte zum Lastschritt 17 nach dem isothermen Abkühlen des Stacks auf Raumtemperatur. Während der Aufheizphase fallen die Verschiebungsbeträge ab, bis sie ihre minimalen Werte während der Betriebsphase im Lastschritt 31 annehmen. Anschließend erfolgt die Abkühlphase mit zunehmenden

Verschiebungen, bis am Ende dieser Prozessphase wieder die Maximalwerte erreicht werden.

In diesem Kapitel wurden die aufgestellten fluiddynamischen und strukturmechanischen Modelle eingesetzt, um das Stack-Verhalten unter vorgegebenen Randbedingungen während eines Prozesszyklus zu simulieren. Hierzu wurden die Prozessphasen: Aufheizen, Betrieb und Abkühlen untersucht. Der Abkühlvorgang des Stacks nach dem Zusammenfügen der Komponenten auf Raumtemperatur wurde ebenfalls betrachtet. Die fluiddynamischen Berechnungen ergaben zunächst die entsprechenden räumlichen Profile der Temperatur und des betragsmäßigen Temperaturgradienten. Mit den berechneten thermischen Lasten wurden anschließend die entsprechenden räumlichen Feldgrößen: Spannungstensor, Verzerungstensor und Verschiebungsvektor in den Stack-Elementen ermittelt und analysiert.

Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass die höchsten Spannungen während der Aufheizphase auftreten. Die während der anderen Prozessphasen hervorgerufenen Spannungen sind vergleichsweise niedriger. Dies ist auf den existierenden Temperaturgradienten zurückzuführen, dessen Betrag während der Aufheizung am größten ist. In den anderen Prozessphasen ist die Temperatur gleichmäßiger verteilt, was zu geringeren Spannungen führt. Die Stack-Komponenten erfahren im Allgemeinen geringe Deformationen, weshalb die Gewährleistung der Stack-Funktionalität nicht beeinträchtigt wird.

Aufgrund der hohen Spannungen der Aufheizphase werden im nächsten Kapitel die fluiddynamischen Randbedingungen dieser Prozessphase betrachtet, um deren Auswirkungen auf die verursachten Spannungen zu untersuchen. Dabei ist das Ziel, die Spannungen insbesondere in der Glasfügung zu reduzieren.

7 Optimierungsanalyse

Wie bereits in Kapitel 4 gezeigt, können die entwickelten Modelle eingesetzt werden, um materialbezogene Optimierungsuntersuchungen durchzuführen. Dabei wird das Ziel verfolgt, die im Stack auftretenden Spannungen zu minimieren. Insbesondere die Glasfügung stellt eine gefährdete Komponente dar, die durch die Materialempfindlichkeit den Zugspannungen gegenüber gekennzeichnet ist. In Kapitel 4 wurde mit Hilfe der Optimierungsanalyse die Anpassung der Wärmeausdehnungskoeffizienten der Glasfügung und des Stahls durchgeführt, um die Zugspannungen im Glas zu verringern. In diesem Kapitel wird dieses Ziel weiterverfolgt, wobei die Auswirkungen anderer Einflussgrößen auf die in der Glasfügung auftretenden Spannungen betrachtet werden. Zu diesem Zweck werden zunächst prozessbedingte Analysen durchgeführt und anschließend geometrische Designgrößen variiert.

Neben den bereits vorgestellten physikalischen Eigenschaften und Parameter der Materialmodelle existieren weitere Faktoren, die das strukturelle Verhalten des Stacks beeinflussen. Im Folgenden werden verschiedene fluiddynamische Prozessrandbedingungen betrachtet und deren Auswirkungen auf die im Stack auftretenden Spannungen untersucht. Ziel dabei ist es, die Prozessrandbedingungen zu ermitteln, die zur Reduzierung der maximalen Spannungen in der Glasfügung führen.

Zusätzlich zu ihrem Einfluss auf die im Stack auftretenden Spannungen stellen die Randbedingungen des fluiddynamischen Prozesses ein Maß für die Funktionalität des SOFC-Stacks dar, die von der Aufheizgeschwindigkeit und der Gleichmäßigkeit der Temperaturverteilung in der Zelle abhängt. In diesem Zusammenhang gelten die Prozessbedingungen als weitere Optimierungsziele. Die fluiddynamische Analyse ermöglicht die Untersuchung solcher prozessbedingten Optimierungsziele, wie in diesem Kapitel gezeigt wird.

7.1 Prozessoptimierung

7.1.1 Definition der Randbedingungen

Aufgrund der komplexen Geometrie der Einzelkomponenten sowie nicht angepasster mechanischer und thermischer Materialeigenschaften der einzelnen SOFC-Bauteile erfordert der Prozesszyklus möglichst gleichmäßige und kontrollierte Aufheizung. Wie bereits erläutert, treten die maximalen Spannungen während der Aufheizphase auf, da in dieser Prozessphase die Temperaturgradienten sowie die Differenzen zwischen höchster und niedrigster Temperatur im Stack erscheinen. Demzufolge ist es erforderlich, diese Prozessphase näher zu betrachten, wobei das Ziel einer optimierten Stack-Aufheizung verfolgt wird, die zur Minimierung der Temperaturgradienten in den Stack-Komponenten führt. Im Folgenden wird zwecks der Prozessoptimierung die Stack-Aufheizung mittels unterschiedlicher Aufheizkurven durchgeführt und die Auswirkungen auf die hervorgerufenen Spannungen analysiert. Dabei werden zeitliche Änderungen der Aufheizgeschwindigkeit und deren Einfluss auf die räumliche Temperaturverteilung und die lokalen Spannungsspitzen im Stack überprüft. Um einen Vergleich mit den Berechnungen, die mit Hilfe der linearen Aufheizkurve durchgeführt sind, zu ermöglichen, werden die gleichen fluiddynamischen Randbedingungen angenommen, die in der Tabelle 7.1 zusammengefasst sind und sowohl luft- als auch brenngasseitig gelten.

Weiterhin werden die in linken Teil der Abbildung 7.1 dargestellten Aufheizkurven eingesetzt, die bezüglich der zeitlichen Änderung der Aufheizgeschwindigkeit unterschiedliche Eigenschaften aufweisen. Die Aufheizgeschwindigkeit wird der ersten Ableitung der Aufheizkurve nach der Zeit entnommen, deren Verlauf im rechten Teil der Abbildung 7.1 dargestellt ist. Kurve A ist durch eine exponentielle Funktion der Gastemperatur von der Zeit charakterisiert und zeigt einen fallenden Verlauf der Aufheizgeschwindigkeit über den betrachteten Zeitraum. Kurve B ist am Anfang durch einen Anstieg und am Ende durch einen Abfall der Aufheizgeschwindigkeit gekennzeichnet und wird durch einen trigonometrischen Zusammenhang zwischen Gastemperratur und Zeit beschrieben. Durch den linearen Verlauf hat Kurve C eine konstante Aufheizgeschwindigkeit.

Tabelle 7.1: Fluiddynamische Prozessrandbedingungen mit Luft als Aufheizmedium

Randbedingung	Betrag
Anfangstemperatur der Gase	50 °C
Endtemperatur der Gase	750 °C
Massenströme	5 NL/min/Ebene
Aufheizzeit	6000 s

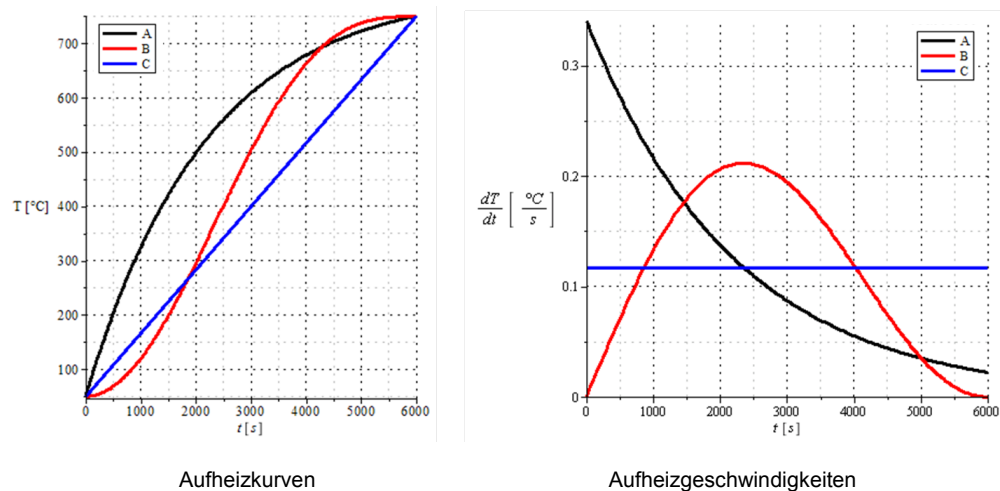


Abbildung 7.1: Zeitlicher Verlauf der Aufheizkurven und der Aufheizgeschwindigkeiten

Durch die Fixierung des Intervalls der Aufheizzeit sowie der Anfang- und der Endtemperaturen gemäß den Bedingungen

$$0 \leq t \leq 6000 \text{ s}$$

(7.1)

und

$$50^{\circ}\text{C} \leq T \leq 750^{\circ}\text{C} \quad (7.2)$$

ist die lineare Aufheizkurve vollständig beschrieben. Dagegen wird zur Ermittlung der Kurvenverläufe A und B die Optimierungstechnik bei der fluiddynamischen Analyse eingesetzt, um geeignete Parameter der Zeitfunktionen (a bzw. b und c) der Form

$$T_A = T_{\max} \left(1 - e^{\frac{-t}{a}} \right) + 50 \quad (7.3)$$

und

$$T_B = T_{\max} \left(\sin^b \left(\frac{-\pi}{c * t_{\max}} * t - \frac{\pi}{2} \right) + 1 \right) + 50 \quad (7.4)$$

zu ermitteln. Hierbei wird die Temperaturdifferenz im Körper

$$\Theta = T_{\max} - T_{\min} \quad (7.5)$$

als Zielfunktion aufgestellt, deren Minimierung angestrebt wird, wie im Abschnitt 5.2 erläutert wurde. Mit den erzeugten Aufheizkurven wird zunächst die numerische fluiddynamische Analyse durchgeführt, um die entsprechenden Temperaturverteilungen im Stack zu bestimmen.

7.1.2 Fallstudie A

In diesem Fall wird der Aufheizprozess gemäß Kurve A in Abbildung 7.1 durchgeführt. Zunächst werden die Ergebnisse der thermischen Analyse betrachtet. Aus prozesstechnischen Gründen sind die maximale Temperatur der Zelle und ihre Verteilung von besonderer Bedeutung. Das Temperaturprofil in Abbildung 7.2 zeigt am Ende der Aufheizphase einen maximalen Wert von 658.77°C , der einem Θ -Wert von $53,84^{\circ}\text{C}$ entspricht.

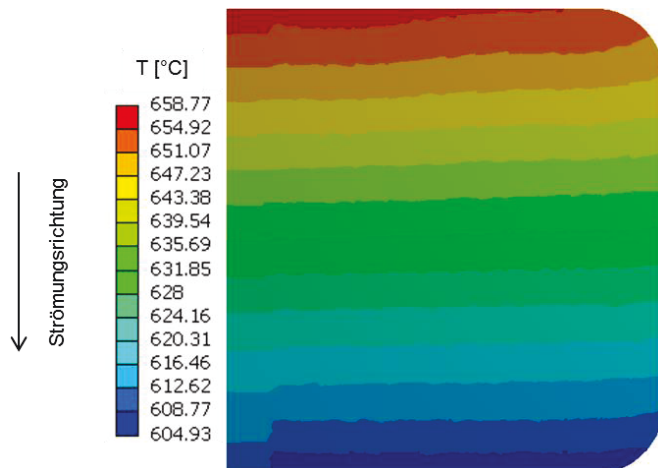


Abbildung 7.2: Temperaturverteilung in der Zelle am Ende der Aufheizung für Fall A

Für die Untersuchung des globalen Stack-Verhaltens sind im linken Teil der Abbildung 7.3 die resultierenden Verläufe der minimalen und maximalen Stack-Temperaturen über die Zeit zusammen mit der Aufheizkurve gezeigt. Der am Anfang steile Kurvenverlauf deutet auf eine hohe Anfangs-Aufheizgeschwindigkeit hin, die im Bereich von 20 °C/min liegt, was zu hohen lokalen Temperaturgradienten führt. Weiterhin fällt bei der globalen Betrachtung der Stack-Temperaturen auf, dass die Differenz zwischen dem maximalen und dem minimalen Wert ebenfalls am Anfang steil steigt. Dieses Verhalten ist im rechten Teil der Abbildung 7.3 anhand der extrahierten Größe Θ deutlicher zu erkennen. Der Θ -Zeit-Verlauf ist bei einem homogenen Körper charakteristisch für den Spannungs-Zeit-Verlauf. Bei der Annahme eines homogenisierten Körpers zeigen $\Theta(t)$ und $\sigma(t)$ ähnliche Zeitabhängigkeiten.

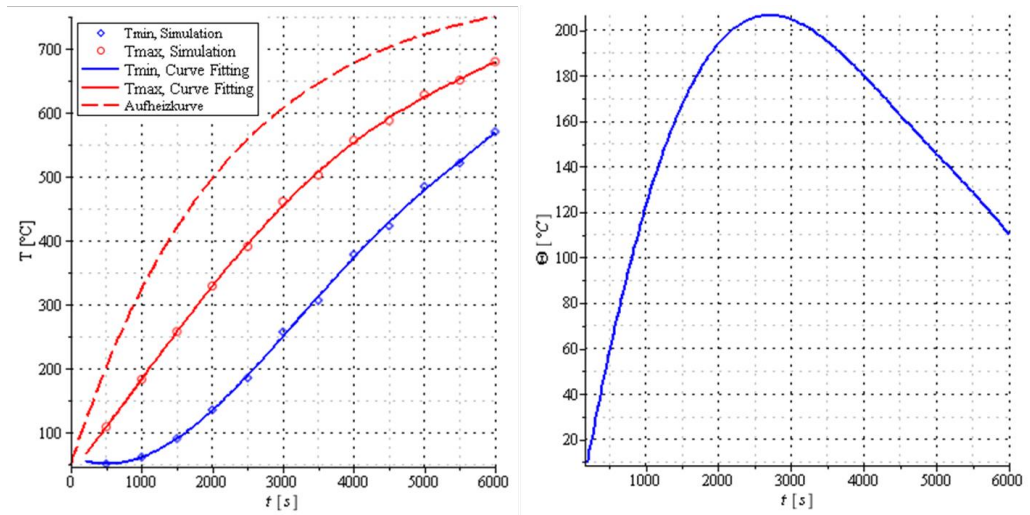


Abbildung 7.3: Verlauf der Temperaturen und Θ im Stack über die Aufheizzeit für Fall A

Die hohe Aufheizgeschwindigkeit bewirkt den schnelleren Anstieg der maximalen Stack-Temperatur im Einströmbereich, während die minimale Stack-Temperatur im Ausströmbereich viel langsamer zunimmt, wie die entsprechenden Kurvenverläufe erkennen lassen. Der inhomogenen Temperaturverteilung entsprechend ist die thermische Dehnung auch ungleichmäßig verteilt und die Deformationsbehinderung der Struktur groß. Dies führt zu hohen Spannungen sowohl im Stahl als auch in der Glasföugung. Die Spannungen nehmen im Laufe der Aufheizzeit zu, bis ein lokales Maximum erreicht wird, wie in Abbildung 7.4 zu sehen ist. Dabei ist zu beachten, dass die maximalen Spannungen in den jeweiligen Materialkomponenten an unterschiedlichen Orten auftreten. Ein typischer Ort, wo höhere Spannungen im Stahl existieren, liegt in der Umgebung des Einströmbereichs der heißen Gase. Dagegen liegt die maximale Spannung der Glasföugung im äußeren Randbereich, wo große Deformationen auftreten und aufgrund der Materialinhomogenität höhere Spannungen verursacht werden.

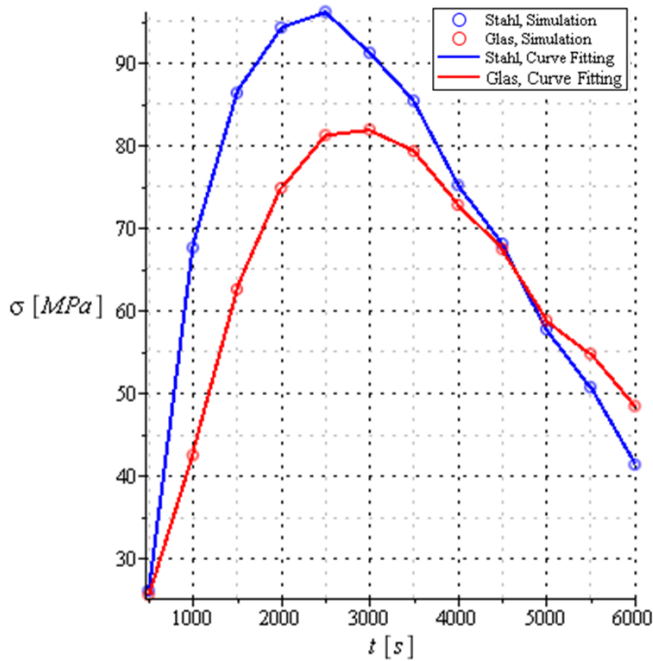


Abbildung 7.4: zeitlicher Verlauf der maximalen Spannung für Fall A

Nachdem das lokale Spannungsmaximum erreicht wird, sinken die verursachten Spannungen im Stack als Folge abnehmender Aufheizgeschwindigkeit und somit steigender Homogenität der Temperaturverteilung, wie aus dem $\Theta(t)$ -Verlauf abzulesen ist.

7.1.3 Fallstudie B

In diesem Fall wird die Aufheizkurve B in Abbildung 7.1 verwendet. Die thermische Analyse für diese Studie liefert die in Abbildung 7.5 dargestellte Temperaturverteilung in der Zelle am Ende der Aufheizphase. Die maximale Zellentemperatur liegt bei 634,76 °C niedriger als im Fall A. Dagegen hat Θ einen vergleichsweise höheren Wert von 70,58 °C, weshalb die Temperaturverteilung weniger gleichmäßig als im Fall A ausfällt. Die zeitlichen Verläufe der maximalen und minimalen Stack-Temperatur werden mit der Aufheizkurve im linken Teil der Abbildung 7.6 verglichen. Die anfangs flache Aufheizkurve verursacht den langsamen Anstieg der Aufheizgeschwindigkeit und folglich einen flachen Verlauf der Größe Θ über die Zeit, wie im linken Teil der Abbildung 7.6 zu sehen ist. Dieser Kurvenverlauf ist charakteristisch für die globale Temperaturverteilung im Stack zu jedem betrachteten Zeitpunkt.

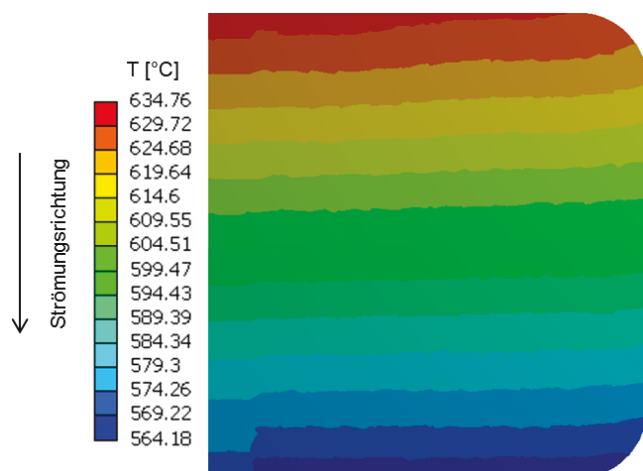
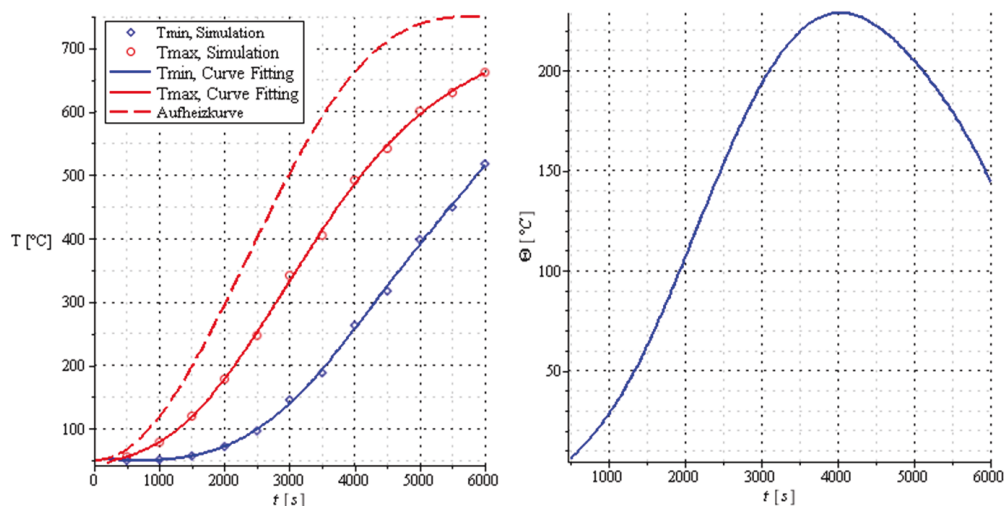


Abbildung 7.5: Temperaturverteilung in der Zelle am Ende der Aufheizung für Fall B


Abbildung 7.6: Verlauf der Temperaturen und Θ im Stack über die Aufheizzeit für Fall B

Die Existenz eines lokalen Maximums in der Θ -Zeit-Kurve deutet darauf hin, dass die Inhomogenität der Temperaturverteilung ebenfalls steigt und anschließend abnimmt. Dieses Verhalten lässt sich im zeitlichen Verlauf der Spannungen im Stack wiederfinden, wie in Abbildung 7.6 deutlich zu erkennen ist. Nachdem das lokale Spannungsmaximum erreicht wird, sinken die im Stack auftretenden Spannungen infolge abnehmender Aufheizgeschwindigkeit und somit steigender Homogenität des Temperaturfeldes. Am Ende der Aufheizphase erreichen die Spannungen ihre niedrigsten Werte.

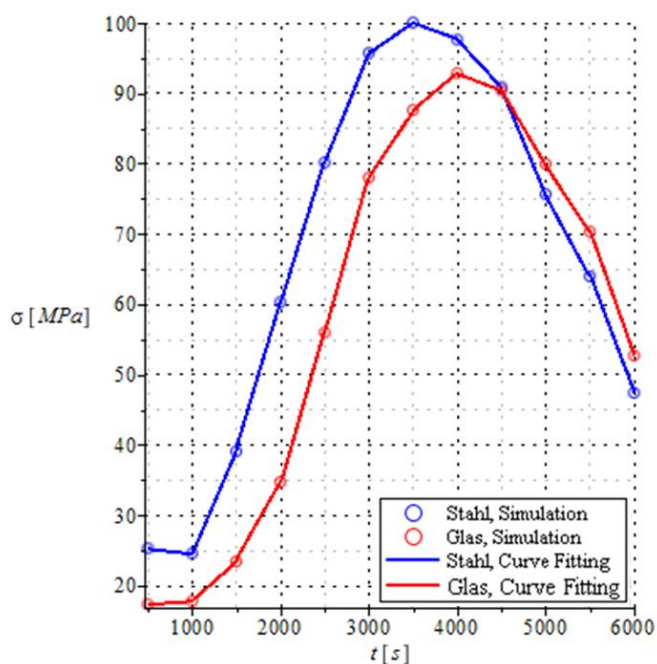


Abbildung 7.6: zeitlicher Verlauf der maximalen Spannung für Fall B

7.1.4 Fallstudie C

In diesem Fall erfolgt die Aufheizung nach Kurve C in Abbildung 7.1. Das Temperaturprofil der Zelle am Ende der Aufheizphase ist in Abbildung 7.7 dargestellt. Auffällig sind die niedrigeren Temperaturen im Vergleich zu den vorher betrachteten Fällen, A und B. Die maximale Temperatur der Zelle liegt bei 584 °C und die Differenz zwischen maximaler und minimaler Zelltemperatur hat einen Wert von 87,5 °C.

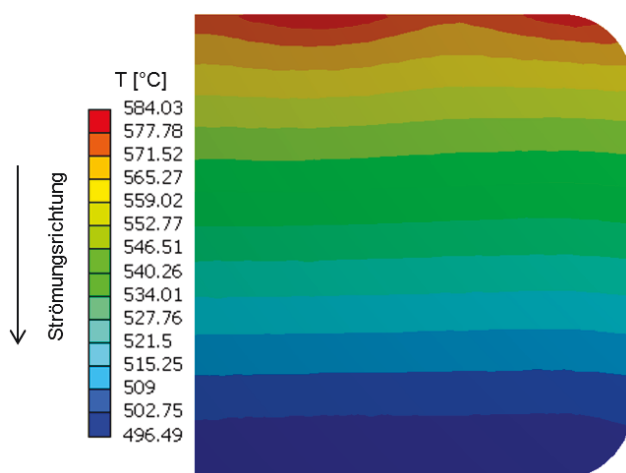
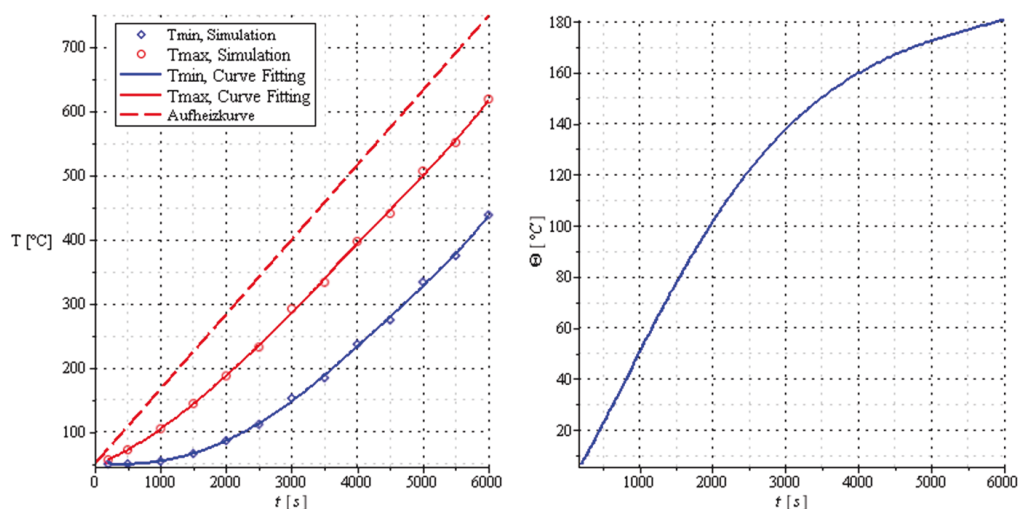


Abbildung 7.7: Temperaturverteilung in der Zelle am Ende der Aufheizung für Fall C

Abbildung 7.8 zeigt den zeitlichen Verlauf der maximalen und minimalen Stack-Temperaturen im Vergleich zur Aufheizkurve. In diesem Fall bleibt die Aufheizgeschwindigkeit über die Aufheizzeit konstant. Folglich hat die Θ -Zeit-Kurve einen monoton steigenden Verlauf, wie im rechten Teil der Abbildung 7.8 zu sehen ist. Dementsprechend folgt der Verlauf der Spannungen über die Zeit einer monoton steigenden Kurve, wie Abbildung 7.9 zeigt. Die Spannungen erreichen ihre Höchstwerte am Ende der Aufheizzeit, wobei der Verlauf der Spannungs-Zeit-Kurve mit zunehmender Zeit flacher wird.


 Abbildung 7.8: Verlauf der Temperaturen und Θ im Stack über die Aufheizzeit für Fall C

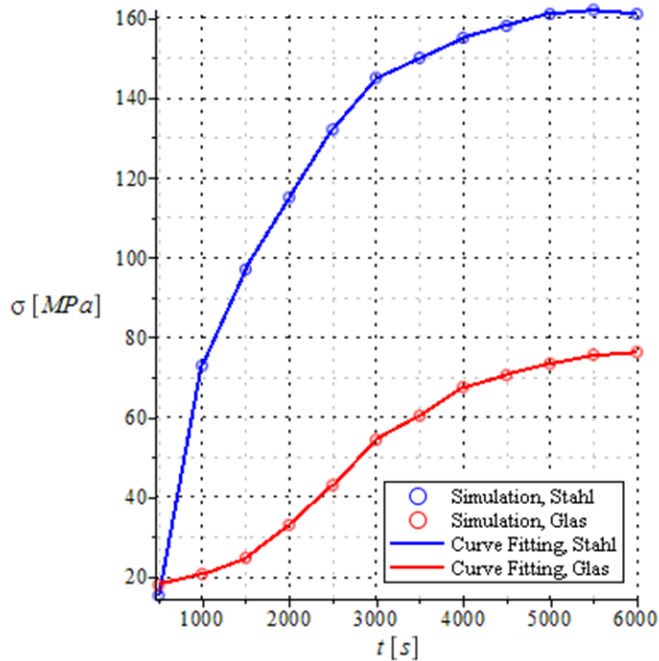


Abbildung 7.9: zeitlicher Verlauf der maximalen Spannung für Fall C

7.1.5 Vergleich der Ergebnisse

Da die Temperaturverteilung in der Zelle für den Betrieb des SOFC-Stack von grundlegender Bedeutung ist, werden zunächst die Auswirkungen der Variation der Randbedingungen auf das thermische Verhalten der Zelle verglichen. Zu diesem Zweck sind in Abbildung 7.10 die ermittelten maximalen und minimalen Zellentemperaturen am Ende des Aufheizprozesses für die untersuchten Aufheizkurven zusammengestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass die Aufheizung gemäß Kurve A zur höchsten Zellentemperatur und niedrigsten Temperaturdifferenz führt. Im Gegensatz hierzu liefert die Aufheizung entsprechend Kurve C die niedrigsten maximalen und minimalen Temperaturen sowie die größte Differenz zwischen den beiden. Demzufolge wäre Kurve A besser geeignet als die beiden anderen Kurven, um den Aufheizprozess durchzuführen.

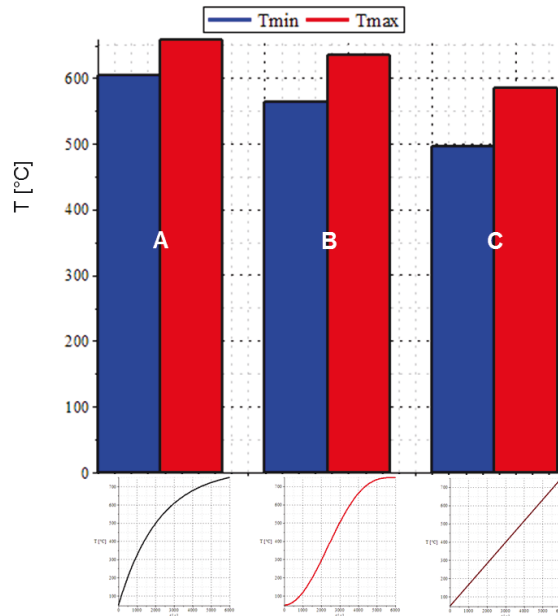


Abbildung 7.10: Maximale und minimale Temperatur in der Zelle am Ende der Aufheizung

Ein weiteres Vergleichskriterium der untersuchten Aufheizkurven stellt das entsprechende thermomechanische Stack-Verhalten dar. Da sich die mechanischen Auflagerungen und die verwendeten Materialien in den betrachteten Fällen nicht ändern, sind die hervorgerufenen inneren Spannungen auf die Unterschiede in der Temperaturverteilung und die Auswirkungen der Materialinhomogenität zurückzuführen. Ferner zeigen die Versuche, dass ein Versagen der Glasfügung des Stacks von der Gleichmäßigkeit der Temperaturverteilung abhängt. Daher ist es erforderlich und anstrebenswert, die Differenz zwischen maximaler und minimaler Temperatur im Festkörper so niedrig wie möglich zu halten. Abbildung 7.11 zeigt zum Vergleich der betrachteten Fälle die zeitlichen Verläufe von Θ im Stack und der maximalen Spannung σ in der Glasfügung, wobei die Ähnlichkeit der Kurven deutlich zu erkennen ist.

Die Aufheizung gemäß Kurve C führt zu niedrigeren Spannungen, die am Ende des Aufheizprozesses auftreten. Die Aufheizung entsprechend den Kurven A und B verursacht höhere Spannungen während der Aufheizung, die bis zum Prozessende abfallen. Die resultierenden Kurvenverläufe der Fälle A und B zeigen die Notwendigkeit einer feineren Auflösung der Zeitschritte bei der Betrachtung der transienten Aufheizphase, denn die maximalen Spannungswerte treten während des Aufheizprozesses auf, anders als im Fall C, wo die zeitlich höchsten Spannungen am Prozessende erscheinen.

Zur besseren Übersicht sind die ermittelten Ergebnisse in Abbildung 7.12 zusammengestellt. Die erreichten maximalen und minimalen Temperaturen entsprechen denen, die in der Zelle auftreten. Dennoch liegen die globalen Extremwerte der Stack-Temperaturen außerhalb der Zelle, weshalb die jeweiligen maximal und minimal Werte in Abbildung 7.12 höher bzw. niedriger sind als in Abbildung 7.10. Des Weiteren ist darauf zu achten, dass die dargestellten Temperaturen am Ende der Aufheizphase auftreten, während die Spannungen nur im Fall C zum gleichen Zeitpunkt erscheinen. Dagegen entsprechen die Spannungen in den Fällen A

und B Zeitpunkten, die vor dem Ende der Aufheizung liegen. Der räumliche Ort der maximalen Spannung in der Glasfugung fur die betrachteten Falle ist in Abbildung 7.13 dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Hochstwerte der Zugspannung in der gleichen Umgebung auftreten, namlich in der Grenzflache zwischen der unteren Platte und der Glasfugung. Aufgrund ihrer Materialeigenschaften und Geometrie hat die Stahlplatte eine hohere Steifigkeit als die anschließende Glasfugung und dominiert somit das Verformungsverhalten der Struktur.

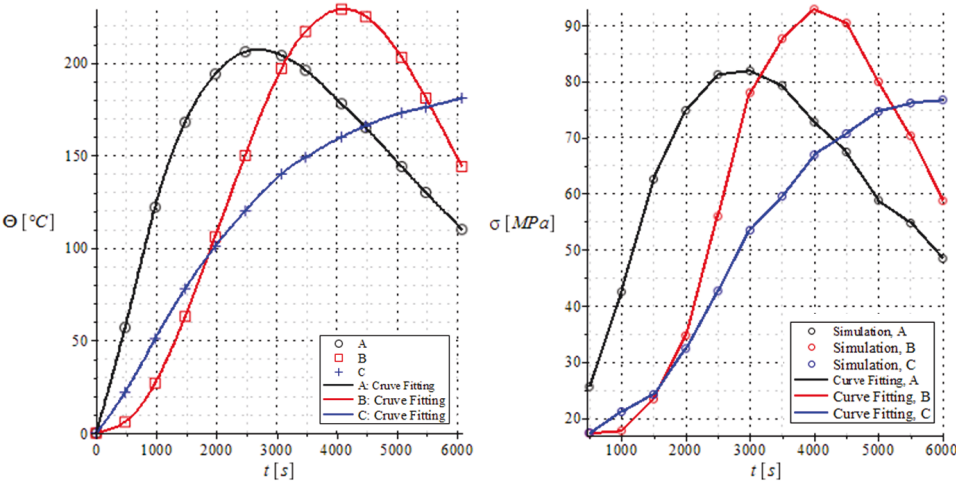


Abbildung 7.11: Zeitlicher Verlauf von Θ und σ fur die Glasfugung

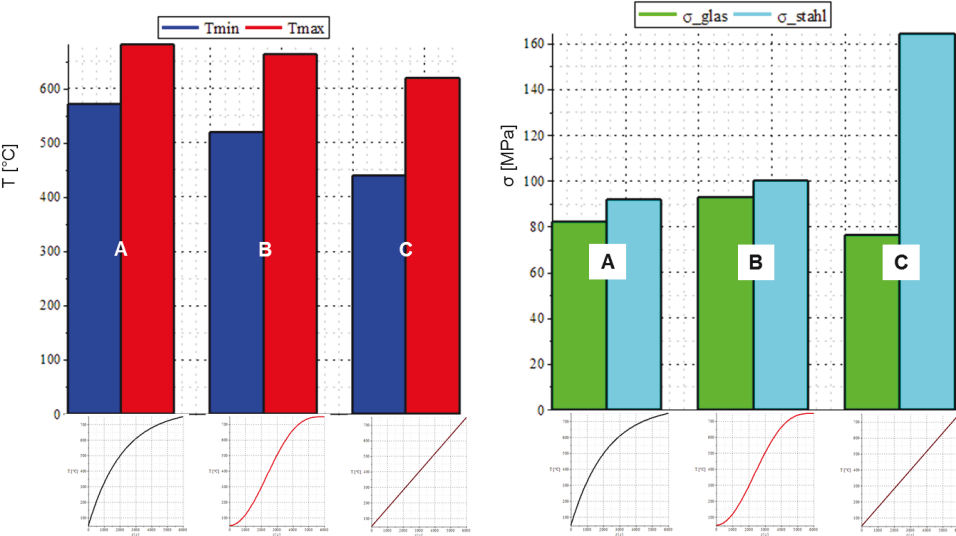


Abbildung 7.12: Temperatur- und Spannungsniveaus im Stack

Mit den aufgestellten Berechnungsmodellen ist es möglich, den Einfluss der Variation der fluiddynamischen Randbedingungen auf das thermische sowie auf das strukturelle Stack-Verhalten zu untersuchen. Dabei werden die Optimierungsziele verfolgt:

- Höhere Zellentemperatur zum Starten der Betriebsphase
- Geringe Inhomogenität der Temperaturverteilung
- Niedrige mechanische Spannungen

Die Aufheizung gemäß Kurve A hat gegenüber den anderen Kurven den Vorteil, dass sie zu höheren und gleichmäßigeren Zellentemperaturen führt und somit für den Start der Betriebsphase besser geeignet ist. Allerdings bewirkt sie etwas höhere Spannung in der Glasfögunq. Auf die Reduzierung dieser Spannungen wird im nächsten Abschnitt eingegangen, wobei die Auswirkungen geometrischer Parameter analysiert werden.

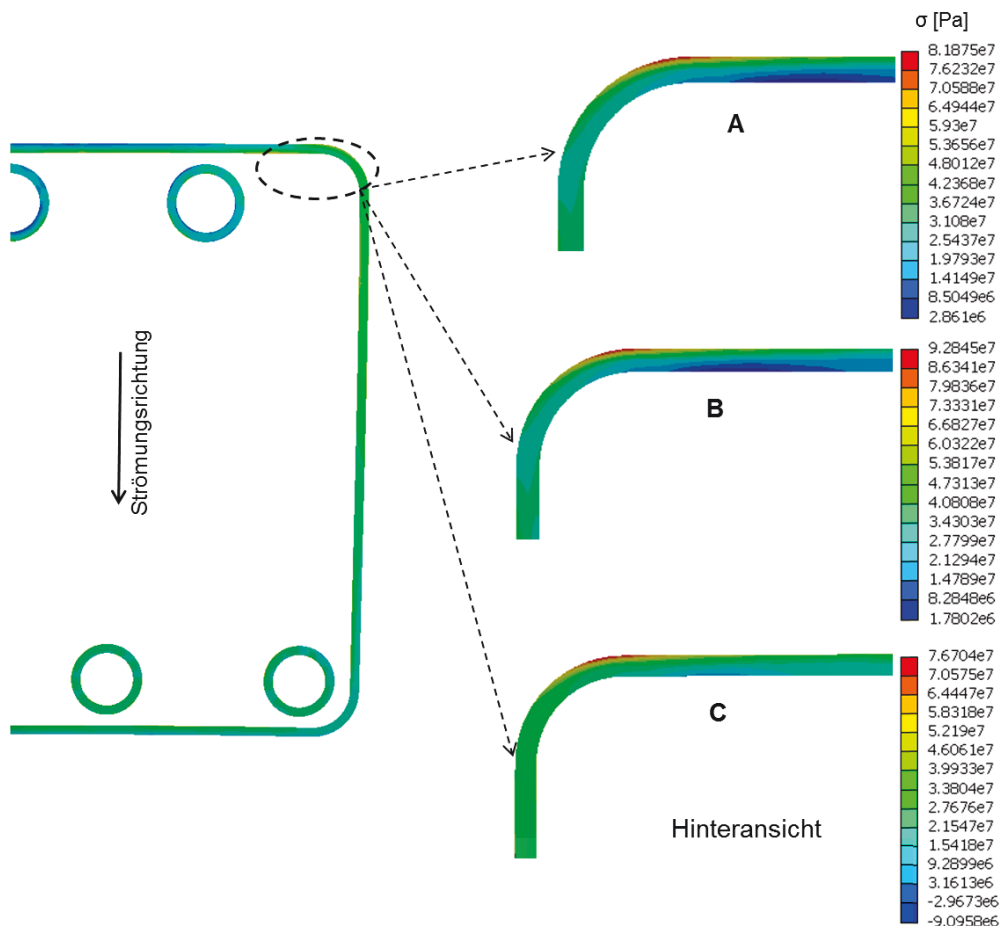


Abbildung 7.13: Ort der maximalen Spannung in der Glasfögunq

7.2 Design-Optimierung

Mit Hilfe der aufgestellten Modelle lassen sich weitere Einflussparameter untersuchen, die das thermomechanische Stack-Verhalten charakterisieren. Dabei wird das Ziel verfolgt, die in der Glasfügung auftretenden Spannungen zu reduzieren. Ein weiterer Faktor, der das thermomechanische Stack-Verhalten beeinflusst, ist die Strukturgeometrie. Im Folgenden wird die Variation geometrischer Größen der Glasfügung betrachtet und deren Auswirkungen auf das auftretende Spannungsniveau untersucht. Es liegt nahe, den Querschnitt der Glasfügung zu vergrößern, indem deren Breite von ursprünglich 2 mm auf 3 mm erhöht wird. Um den Rechenaufwand im Rahmen zu halten, wird die in Kapitel 4 vorgestellte „Submodeling“-Technik eingesetzt. Als „Submodel“ wird der Bereich betrachtet, wo die höchste Spannung auftritt, wie in Abbildung 7.14 dargestellt. Hierbei wird das thermomechanische Verhalten des Modells am Ende der Aufheizphase betrachtet, wenn die Stack-Aufheizung gemäß Kurve C durchgeführt wird.

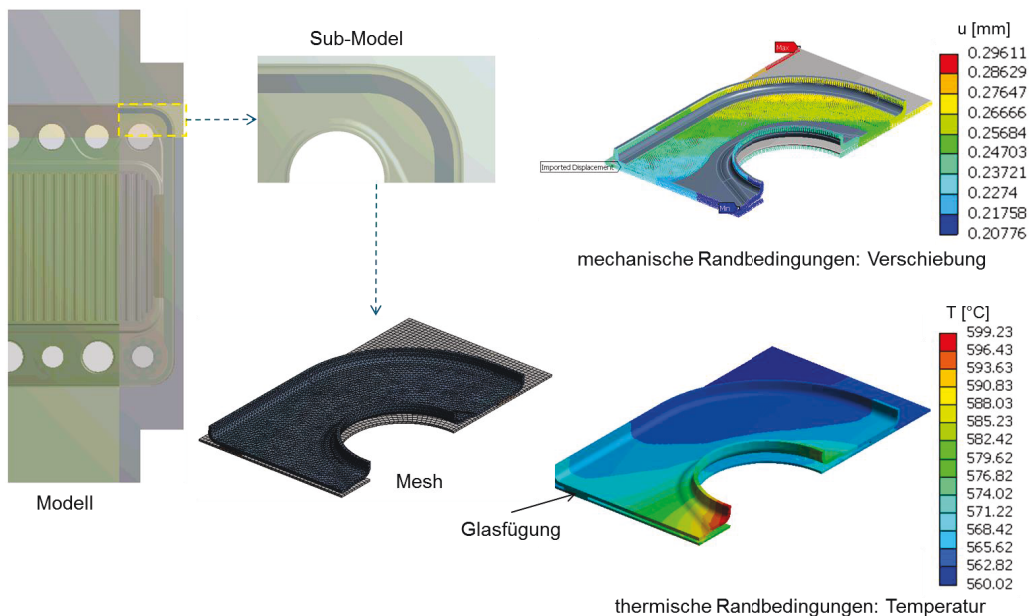


Abbildung 7.14: Ausgangssituation: Geometrie und Randbedingungen

In diesem Zustand treten in der Glasfügung die maximalen Spannungen auf. Die entsprechenden thermischen und mechanischen Randbedingungen werden aus der Berechnung mit dem ganzen Modell übertragen. Das „Submodel“ wird feiner diskretisiert, um genauere Spannungswerte zu erhalten. Die ursprüngliche und die modifizierte Geometrie der Glasfügung sind zum Vergleich in Abbildung 7.15 zusammengestellt.

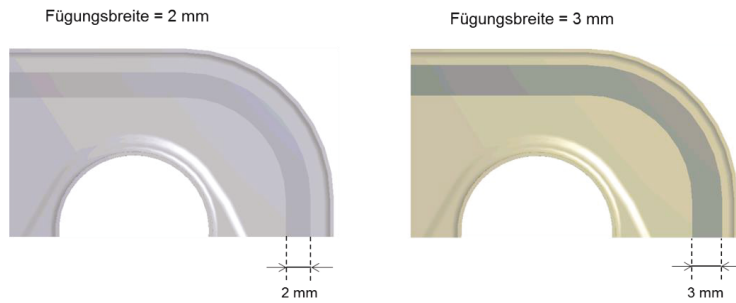
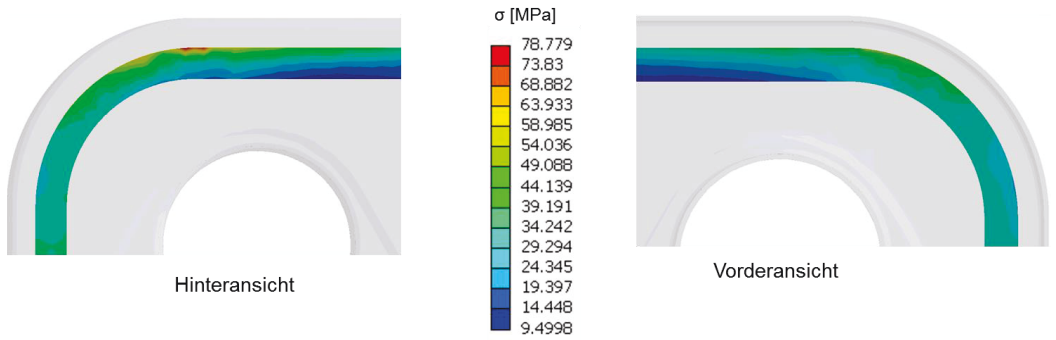


Abbildung 7.15: Ursprüngliche und modifizierte Glasfügung

Die Spannungsprofile im Originalmodell sowie im Modell mit optimierter Geometrie werden in Abbildung 7.16 verglichen. Durch die Optimierung verringert sich die maximale Spannung in der Glasfügung von 78,8 MPa auf 63,8 MPa, was einer Reduktion von ungefähr 20% entspricht. Die niedrigere Spannung in der optimierten Glasfügung lässt sich durch die größere Querschnittsfläche erklären.

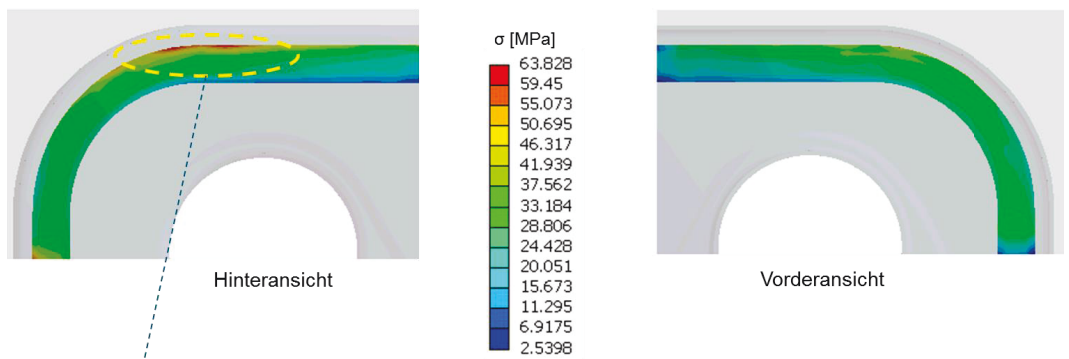
Die durchgeführten Optimierungsanalysen zeigen das Potenzial der aufgestellten Modelle und deren Einsatzmöglichkeiten zwecks Vorhersage der Auswirkungen von Einflussparametern, wie Materialeigenschaften, Prozessrandbedingungen und Geometrie auf das thermische und strukturelle Verhalten. Das Hauptziel der Optimierung besteht in der Reduzierung der hervorgerufenen Spannungen insbesondere in der Glasfügung aufgrund ihrer Empfindlichkeit gegenüber Zugspannungen. Des Weiteren wurde auch gezeigt, wie die fluiddynamische Simulation zwecks Optimierung der Aufheizung eingesetzt werden kann. Zu diesem Zweck wurde die Aufheizgeschwindigkeit während der Aufheizphase variiert und die entsprechenden Temperaturprofile sowie die dadurch verursachten Spannungen ermittelt und analysiert.

Füguingsbreite = 2 mm



$$\sigma_{\max} = 78.78 \text{ MPa}$$

Füguingsbreite = 3 mm



$$\sigma_{\max} = 63.83 \text{ MPa}$$

Abbildung 7.16: Spannungsverteilung in der Glasfüguing vor und nach der Optimierung

8 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des Verbundvorhabens

„Metallgestützter SOFC-Leichtbau-Stack für die Bordstromversorgung in Nutzfahrzeugen (MetAPU)“

mit den Verbundpartnern ElringKlinger AG, Plansee Composite Materials GmbH und Forschungszentrum Jülich GmbH. Gefördert wurde das Projekt vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi).

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines 3-dimensionalen multiphysikalischen Gesamtmodells zur Vorhersage des gekoppelten fluiddynamischen und strukturellen Verhaltens eines SOFC-Stacks unter thermomechanischer Belastung. Mit Hilfe der Simulationstechnik sind die räumlichen Temperaturprofile und Spannungsverteilungen im gesamten SOFC-Stack zu ermitteln, um kritische Stellen hinsichtlich der Tragfähigkeit und Gebrauchstauglichkeit der Stack-Komponenten zu lokalisieren. Weiterhin dient das Berechnungsmodell als Basis für Optimierungsanalysen, um die Auswirkungen von Maßnahmen zur Reduzierung der Spannungsspitzen in den Stack-Komponenten zu untersuchen.

Hauptproblem beim Einsatz von SOFCs stellen Undichtigkeiten durch Rissbildung in spröden Komponenten mit vergleichsweise niedriger Steifigkeit und Festigkeit dar, die infolge der hervorgerufenen inneren Spannungen in einigen Bereichen bedingt durch thermomechanische Überlastung auftritt. Thermische Spannungen werden infolge der Behinderung der Strukturverformung hervorgerufen. Dies kann durch mechanische Auflagerung, Materialinhomogenität und ungleichmäßige Temperaturverteilung zustande kommen. Des Weiteren führen temperaturabhängige Materialeigenschaften durch die Existenz eines Temperaturgradienten zur zusätzlichen räumlichen Abhängigkeit der Materialparameter. Daher sind im Allgemeinen zwecks Reduzierung der hervorgerufenen Spannungen in der Struktur eine gleichmäßige Temperaturverteilung und angepasste physikalische Materialeigenschaften der Strukturkomponenten anzustreben. Geometrische Parameter der betrachteten Struktur charakterisieren mit den Materialeigenschaften die Struktursteifigkeit und beschreiben somit ihr mechanisches Deformationsverhalten. Das aufgestellte Simulationsmodell wurde zur Untersuchung der Ursachen für die auftretenden thermischen Spannungen im SOFC-Stack eingesetzt.

Gerade bei hohen SOFC-Temperaturen, unter denen Messungen sehr aufwendig beziehungsweise nur bedingt möglich sind, ist die numerische Modellierung unentbehrlich. Sie ermöglicht einen genaueren Einblick in den Charakter thermomechanischer Prozesse insbesondere unter Berücksichtigung des nichtlinearen temperatur- und zeitabhängigen Verhaltens der verwendeten Werkstoffe als dies bei experimentellen Untersuchungen aufgrund messtechnischer Schwierigkeiten erreichbar ist. Die durchgeführten numerischen Berechnungen gelten dabei als wertvolle Ergänzungen der experimentellen Analysen. Wesentliche Beachtung wurde hierbei auf hohen geometrischen und mathematischen Detaillierungsgrad gelegt. Das Modell berücksichtigt einen kompletten zwei-Zeller-Stack, der alle in der Praxis eingesetzten Komponenten aus mehreren Werkstoffen beinhaltet. Die Berücksichtigung der dünnwandigen Komponenten ermöglicht die Analyse der mechanischen Interaktion und die 3-dimensionale Visualisierung der unterschiedlichen Stack-Elemente.

Somit wurden die multiphysikalischen Phänomene der Fluid-Struktur-Interaktionen anhand der räumlichen Verteilung von Temperaturfeldern eigenständig ermittelt und zur strukturellen

chanischen Lösung verwendet. Auch das Materialverhalten wurde auf Basis experimentell ermittelter Daten über den gesamten Betriebsbereich durch temperatur- und zeitabhängige nichtlineare mathematische Materialmodelle dargestellt. Dabei wurde das Deformationsverhalten der Stack-Struktur unter Berücksichtigung der thermischen, elastisch-plastischen und zeitabhängigen Verzerrungen vollständig nichtlinear beschrieben. Aufbauend darauf wurden für einen kompletten Prozesszyklus bestehend aus Aufheiz-, Betriebs- und Abkühlphase die vollständigen Spannungsfelder ermittelt. Untersucht wurden im Detail die Auswirkungen von Prozess-, Material- und Designparametern auf das thermomechanische Strukturverhalten.

Die computergestützte Simulationstechnik, die als wirksames Werkzeug zur Analyse multiphysikalischer Vorgänge in Strukturen mit komplexer Geometrie gilt, wurde unter Berücksichtigung der tatsächlichen Prozess- und Lastbedingungen sowie des realen Materialverhaltens eingesetzt. Darauf basierend wurde ein dreidimensionales Gesamtmodell für die numerische fluiddynamische und thermomechanische Analyse eines SOFC-Stacks entwickelt. Das Gesamtmodell besteht aus zwei diskretisierten Einzelmodellen, einem fluiddynamischen Finite-Volumen-Modell und einem strukturmekanischen Finite-Elemente-Modell, die numerisch gekoppelt sind. Das Gesamtmodell berücksichtigt einen zwei-Zeller-Stack und eignet sich zur Beschreibung des Deformationsverhaltens der Struktur für den Einsatz als zusätzliche Einheit zur Bordstromerzeugung unter thermomechanischen Lastbedingungen.

Zur Beschreibung des Materialverhaltens wurden entsprechende mathematische Materialmodelle aufgestellt, deren Parameter mit Hilfe experimenteller Daten bestimmt wurden. Die physikalische Nichtlinearität sowie die Temperatur- und Zeitabhängigkeit der mechanischen Materialeigenschaften wurden berücksichtigt und mit Hilfe der ANSYS-Programmiersprache APDL im Modell implementiert.

Mittels der gekoppelten fluiddynamischen Analyse wurden die im Stack auftretenden räumlichen Temperaturfelder berechnet. Anschließend wurden diese als thermische Lastfälle auf das strukturmekanische Finite-Elemente-Modell übertragen, um die quasi-statische Berechnung durchzuführen. Die Berechnungsergebnisse liefern die gesuchten räumlichen Verteilungen der Spannungen, Verzerrungen und Verschiebungen, die lastabhängig sind. Das Modellverhalten wurde unter Variation der Last- und Randbedingungen getestet und die Plausibilität der ermittelten Ergebnisse wurde anhand des Vergleichs mit vereinfachten Modellen überprüft. Danach erfolgte die Validierung der entwickelten Modelle anhand experimenteller Daten.

Die gekoppelte fluiddynamische Simulationsberechnung zeigt, dass das aufgestellte Modell für die Untersuchung des zeitabhängigen thermischen Stack-Verhaltens gut geeignet ist. Das fluiddynamische Modell kann eingesetzt werden, um die räumliche Verteilung der Temperatur und des Temperaturgradienten im Stack in den verschiedenen stationären und transienten Prozessphasen zu bestimmen. Die ermittelten Temperaturprofile dienen als thermische Last und definieren damit einen Teil der erforderlichen Randbedingungen, die für die Durchführung der thermomechanischen Analyse auf Basis der Finite-Elemente-Methode benötigt werden. Die weiteren Randbedingungen sind durch applizierte mechanische Lasten und Auflagerungsreaktionen gegeben. Infolge des großen Temperaturgradienten im Einströmbereich der heißen Gase zeigen die Ergebnisse der fluiddynamischen Berechnungen, dass diese Umgebung eine gefährdete Zone darstellt, wo hohe Spannungen zu erwarten sind.

Das thermomechanische Finite-Elemente-Modell ermöglicht die Vorhersage des Deformationsverhaltens der Stack-Struktur. Mit Hilfe des Modells können die räumlichen Feldgrößen: Spannungstensor, Verzerrungstensor und Verschiebungsvektor in den einzelnen Stack-Komponenten unter verschiedenen Randbedingungen ermittelt werden, die dem realen Prozess entsprechen. Die Mesh-Unabhängigkeit des Modells und dessen Konvergenzverhalten wurden überprüft. Das aufgestellte Berechnungsmodell dient als Werkzeug zur Überprüfung der Tragfähigkeit und der Gebrauchstauglichkeit der einzelnen Komponenten des betrachteten SOFC-Stacks, damit seine Funktionalität gewährleistet wird. Die Modellvalidierung auf Basis der experimentellen Daten bestätigt die ermittelten Simulationsergebnisse und zeigt, dass der Verbund in der Umgebung des Einströmungsbereichs der heißen Gase infolge der Beanspruchung möglicherweise gefährdet ist. Dies stimmt mit den Ergebnissen der fluiddynamischen Analyse sehr gut überein, da in diesem Bereich hohe Temperaturgradienten zu beobachten sind. Die maximalen Spannungen in der Zelle treten im Lasteinleitungsbereich auf, wo die Zelle mit der Oberschale verbunden ist. Daher ist an dieser Stelle eine mit der metallgestützten Zelle verträgliche Schweißverbindung aufgrund ihrer höheren Festigkeit besser geeignet als eine Lötverbindung.

Mit Hilfe des Finite-Elemente-Modells wurden detaillierte Simulationsberechnungen und Parameterstudien durchgeführt, um die Auswirkungen verschiedener Einflussparameter auf die auftretenden Spannungen zu untersuchen. Insbesondere die Auswirkungen nicht angepasster Wärmeausdehnungskoeffizienten der einzelnen Stack-Elemente wurden gezeigt, indem der Stack unter den gleichen Auflagerungsbedingungen durch ein gleichmäßiges Temperaturfeld beansprucht wurde. Bei dieser Art der Belastung können Effekte des Temperaturgradienten ausgeschlossen werden. Der Einsatz von Werkstoffkombinationen mit angepassten thermischen Eigenschaften führt zur Reduzierung der im SOFC-Stack hervorgerufenen Spannungen und verbessert somit das thermomechanische Verhalten der Struktur.

Des Weiteren wurden die Auswirkungen der Variation der Materialkombinationen auf die im Stack hervorgerufenen Spannungen untersucht. Der Vergleich der maximalen Werte der Spannungen zeigt deutlich, dass die Spannungen in der Glasfügung bei inhomogener Aufheizung aufgrund des Temperaturgradienten um den Faktor 2,5 höher liegen. Während bei einem homogenen Temperaturfeld die Spannungen hauptsächlich infolge der unterschiedlichen Wärmeausdehnungskoeffizienten von Stahl und Glaskeramik verursacht werden, führt die Existenz des Temperaturgradienten zu einem komplexen Deformationsverhalten der Struktur. Aufgrund der Temperaturabhängigkeit der physikalischen Materialeigenschaften verursacht die Ungleichmäßigkeit der Temperaturverteilung einen vergleichbaren Effekt wie eine zusätzliche Materialinhomogenität. Daher führen die gleichmäßige Temperaturverteilung und die angepassten physikalischen Materialeigenschaften der Strukturkomponenten zu niedrigeren thermomechanischen Spannungen.

Die aufgestellten fluiddynamischen und strukturmekanischen Modelle wurden eingesetzt, um das Stack-Verhalten unter vorgegebenen Randbedingungen während eines Prozesszyklus zu simulieren. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind Anhaltspunkte, die zeigen, in welchem Bereich des SOFC-Stacks und in welcher Phase die kritischsten Stellen und die gefährdeten Bereiche vorliegen. Darauf basierend ist es möglich, passende Maßnahmen zur Reduzierung der Spannungsspitzen zu ergreifen und ihre Auswirkungen zu analysieren.

Die Prozessphasen: Aufheizen, Betrieb und Abkühlen wurden ausführlich untersucht. Der Abkühlvorgang des Stacks auf Raumtemperatur nach dem Zusammenfügen der Komponenten wurde ebenfalls betrachtet. Die fluiddynamischen Berechnungen ergaben zunächst die

entsprechenden räumlichen Profile der Temperatur und des betragsmäßigen Temperaturgradienten. Mit den berechneten thermischen Lasten wurden anschließend für jede Prozessphase die entsprechenden räumlichen Feldgrößen: Spannungstensor, Verzerrungstensor und Verschiebungsvektor in den Stack-Elementen ermittelt und analysiert. Die Berechnungsergebnisse zeigen, dass die höchsten Spannungen während der Aufheizphase auftreten. Im Vergleich hierzu sinken die während der Betriebs- und Abkühlphase hervorgerufenen Spannungen, beispielsweise in der Glasfügung, jeweils um einen entsprechenden Faktor von 0,6 bzw. 0,2. Dies ist auf den erzeugten Temperaturgradienten zurückzuführen, dessen Betrag während der Aufheizung am größten ist. In den anderen Prozessphasen ist die Temperatur gleichmäßiger verteilt, was zu geringeren Spannungen führt. Die Auswertung der ermittelten Verschiebungsfelder zeigt, dass die Stack-Komponenten im Allgemeinen geringe Deformationen erfahren, weshalb die Gewährleistung der Stack-Funktionalität nicht beeinträchtigt wird.

Des Weiteren verfügen die aufgestellten Modelle über das Potenzial, für Optimierungsanalysen eingesetzt zu werden. Das Hauptziel der Optimierung besteht in der Verringerung der hervorgerufenen Spannungen insbesondere in der Glasfügung aufgrund ihrer Empfindlichkeit gegenüber Zugspannungen. Zu diesem Zweck wurden Untersuchungen mit den Zielen durchgeführt, die physikalischen Materialeigenschaften aufeinander anzupassen und die Auswirkungen geometrischer Designparameter auf das Spannungsfeld zu analysieren. Die Materialoptimierung durch Anpassung der Verträglichkeit der Wärmeausdehnungskoeffizienten bewirkt eine Reduzierung der Spannungen in der Glasfügung um 18%. Mit Hilfe der Designoptimierung und durch Veränderung der geometrischen Strukturparameter verringert sich die maximale Spannung in der Glasfügung um 20%.

Weitere Einsatzmöglichkeiten der aufgestellten Modelle zeigen, wie die fluiddynamische Simulation zwecks Optimierung der Aufheizung verwendet werden kann, um den Gradienten des Temperaturfeldes zu senken. Zu diesem Zweck wurde die Aufheizgeschwindigkeit während der Aufheizphase variiert und die entsprechenden Temperaturprofile sowie die dadurch verursachten Spannungen ermittelt und analysiert. Beispielsweise zeigt sich, dass eine Aufheizung mit konstanter Geschwindigkeit zu den niedrigsten Spannungen in der Glasfügung führt. Im Vergleich hierzu verursacht eine am Anfang hohe und mit der Zeit abnehmende Aufheizgeschwindigkeit eine Zunahme der Spannung um 7%. Die Aufheizung gemäß dieser Aufheizkurve bewirkt allerdings eine geringere Inhomogenität der Temperaturverteilung und liefert durch die höhere Zelltemperatur günstigere Bedingungen für den Start der Betriebsphase der SOFC.

Die durchgeführten Untersuchungen zeigen das Potenzial der aufgestellten Modelle und deren Einsatzmöglichkeiten zwecks Vorhersage der Auswirkungen von Einflussparametern, wie Materialeigenschaften, Prozessrandbedingungen und Geometrie auf das thermische und strukturmechanische Stack-Verhalten. Die detaillierten numerischen Modelle ermöglichen einen gründlichen Einblick in die multiphysikalischen Prozesse während eines SOFC-Betriebszyklus. Somit stellen sie ein wirkungsvolles Werkzeug zur Untersuchung von Design- und Prozessparametern dar und begleiten den Ablauf der Entwicklung von der Entwurfsphase bis hin zum Einsatz des fertigen Produktes.

9 Literaturverzeichnis

- [1] Ormerod R.: Solid oxide fuel cells, *Chem. Soc. Rev.*, vol. 32, no. 1, pp. 17–28, 2002
- [2] Ouweltjes J., Aravind P., Woudstra N., Rietveld G.: Biosyngas utilization in solid oxide fuel cells with Ni / GDC anodes, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, vol. 3, pp. 495–498, 2006
- [3] Steele B.: Fuel-cell technology running on natural gas, *Nature*, vol. 400, no. 6745, pp. 619–621, 1999
- [4] Nguyen-Xuan T.: Optimierung eines Leichtbaudesigns für ein SOFC-Brennstoffzellenstack, Dissertation, RWTH Aachen, 2011
- [5] Fan L., Dimitriou E., Pourquie M., Liu M., Verkooijen A., Aravind P.: Prediction of the performance of a solid oxide fuel cell fuelled with bio-syngas: Influence of different steam-reforming reaction kinetic parameters, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 1, pp. 510–524, 2013
- [6] Riensche E., Achenbach E., Froning D., Haines M., Heidug W., Lokurlu A., Von Andrian S.: Clean combined-cycle SOFC power plant–cell modelling and process analysis, *Journal of Power Sources*, vol. 86, no. 1-2, pp. 404–410, 2000
- [7] Murphy D. M., Richards A. E., Colclasure A. M., Rosensteel W., Sullivan N.: Biogas fuel reforming for solid oxide fuel cells, *ECS Transactions*, vol. 35, no. 1, pp. 2653–2667, 2011
- [8] Mogensen D., Grunwaldt J., Hendriksen P., Dam-Johansen K., Nielsen J.: Internal steam reforming in solid oxide fuel cells: Status and opportunities of kinetic studies and their impact on modelling, *Journal of Power Sources*, vol. 196, no. 1, pp. 25–38, 2011
- [9] Mogensen D.: Methane steam reforming kinetics over Ni-YSZ anode materials for solid oxide fuel cells, Ph.D. Thesis, Technical University of Denmark, 2011
- [10] Hibino T., Hashimoto A., Asano K., Yano M., Suzuki M., Sano M.: An intermediate-temperature solid oxide fuel cell providing higher performance with hydrocarbons than with hydrogen, *Electrochemical and Solid-State Letters*, vol. 5, pp. A242–A244, 2002.
- [11] Brett D., Atkinson A., Brandon N., Skinner S.: Intermediate temperature solid oxide fuel cells, *Chem. Soc. Rev.*, vol. 37, no. 8, pp. 1568–1578, 2008
- [12] Liu M., Aravind P., Woudstra T., Cobas V., Verkooijen A.: Development of an integrated gasifier-SOFC test system: a detailed system study, *Journal of Power Sources*, vol. 196, no. 17, pp. 7277–7289, 2011
- [13] Eguchi K., Kojo H., Takeguchi T., Kikuchi R., Sasaki K.: Fuel flexibility in power generation by solid oxide fuel cells, *Solid State Ionics*, vol. 152, pp. 411–416, 2002
- [14] Coutelieris F., Douvartzides S., Tsiakaras P.: The importance of the fuel choice on the efficiency of a solid oxide fuel cell system, *Journal of Power Sources*, vol. 123, no. 2, pp. 200–205, 2003

- [15] Singhal S. C.: Solid Oxide Fuel Cells: Past, Present and Future, pp. 1-24, in: Solid Oxide Fuel Cells: Facts and Figures, Past, Present and Future Perspectives for SOFC Technology, Editors: Irvine J. T. S., Connor P., London 2013
- [16] Paradis H., Andersson M., Yuan J., Sundén B.: Simulation of alternative fuels for potential utilization in solid oxide fuel cells, *International Journal of Energy Research*, vol. 35, no. 12, pp. 1107–1117, 2011
- [17] Cai Q., Brandon N., Adjiman C.: Modelling the dynamic response of a solid oxide steam electrolyser to transient inputs during renewable hydrogen production, *Frontiers of Energy and Power Engineering in China*, vol. 4, no. 2, pp. 211–222, 2010
- [18] Andersson M., Yuan J., Sundén B.: Review on modeling development for multiscale chemical reactions coupled transport phenomena in solid oxide fuel cells, *Applied Energy*, vol. 87, no. 5, pp. 1461–1476, 2010
- [19] Bove R., Lunghi P., Sammes N. M.: SOFC mathematic model for systems simulations, Part One: From a micro-detailed to macro-black-box model, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 30, no. 2, pp. 181–187, 2005
- [20] Aguiar P., Adjiman C., Brandon N.: Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model-based steadystate performance, *Journal of Power Sources*, vol. 138, no. 1-2, pp. 120–136, 2004
- [21] Nakagawa N., Sagara H., Kato K.: Catalytic activity of Ni-YSZ-CeO₂ anode for the steam reforming of methane in a direct internal-reforming solid oxide fuel cell, *Journal of Power Sources*, vol. 92, no. 1-2, pp. 88–94, 2001
- [22] Vakouftsi E., Marnellos G., Athanasiou C., Coutelieris F.: CFD modeling of a biogas fuelled SOFC, *Solid State Ionics*, vol. 192, no. 1, pp. 458–463, 2011
- [23] Achenbach E.: Three-dimensional and time-dependent simulation of a planar solid oxide fuel cell stack, *Journal of Power Sources*, vol. 49, no. 1, pp. 333–348, 1994
- [24] Rechenauer C.: Dreidimensionale mathematische Modellierung des stationären und instationären Verhaltens oxidkeramischer Hochtemperaturbrennstoffzellen, *Dissertation*, RWTH Aachen, 1993
- [25] Lehnert W., Meusinger J., Thom F.: Modelling of gas transport phenomena in SOFC anodes, *Journal of Power Sources*, vol. 87, no. 1, pp. 57–63, 2000
- [26] Jeongpill K., Daejong K.: Computational model to predict thermal dynamics of planar solid oxide fuel cell stack during start-up process, *Journal of Power Sources*, 195, pp. 3186–3200, 2001
- [27] Yakabe H., Sakurai T.: 3d simulation on the current path in planar SOFCs, *Solid State Ionics*, vol. 174, no. 1-4, pp. 295–302, 2004
- [28] Dicks A.: Advances in catalysts for internal reforming in high temperature fuel cells, *Journal of Power Sources*, vol. 71, no. 1-2, pp. 111–122, 1998.
- [29] Dicks A., Pointon K., Siddle A.: Intrinsic reaction kinetics of methane steam reforming on a nickel/zirconia anode, *Journal of Power Sources*, vol. 86, no. 1-2, pp. 523–530, 2000
- [30] Achenbach E., Riensche E.: Methane/steam reforming kinetics for solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, vol. 52, no. 2, pp. 283–288, 1994

- [31] Zhu H., Kee R. J., Janardhanan V. M., Deutschmann O., Goodwin D. G.: Modeling elementary heterogeneous chemistry and electrochemistry in solid oxide fuel cells, *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 152, no. 12, pp. A2427–A2440, 2005
- [32] Yi Y., Rao A., Brouwer J., Samuelsen G.: Fuel flexibility study of an integrated 25 kW SOFC reformer system, *Journal of Power Sources*, vol. 144, no. 1, pp. 67–76, 2005
- [33] Fan L., Qu Z., Pourquie M., Verkooijen A., Aravind P.: Computational studies for the evaluation of fuel flexibility in solid oxide fuel cells: A case with bio-syngas, *Fuel Cells*, vol. 13, no. 3, pp. 410–427, 2013
- [34] Winkler W.: *Brennstoffzellenanlagen*, pp. 189, Berlin Heidelberg, 2002
- [35] Aravind P., Schilt C., Türker B., Woudstra T.: Thermodynamic model of a very high efficiency power plant based on a biomass gasifier, SOFCs, and a gas turbine, *International Journal of Renewable Energy Development*, vol. 1, no. 2, pp. 51–55, 2012
- [36] O'Hayre R., Cha S.-W., Colella, W., Prinz, F. B., *Fuel Cell Fundamentals* second edition, pp. 19, New York, 2009
- [37] Zhu H., Kee R. J.: Two-dimensional model of distributed charge transfer and internal reforming within unit cells of segmented-in-series solid-oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, vol. 196, no. 18, pp. 7654–7664, 2011
- [38] Aravind P., de Jong W.: Evaluation of high temperature gas cleaning options for biomass gasification product gas for solid oxide fuel cells, *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 38, no. 6, pp. 737–764, 2012
- [39] Aravind P., Ouweltjes J., de Heer E., Woudstra N., Rietveld G.: Impact of bio-syngas and its components on SOFC anodes, vol. 2005. *Electrochemical Society Proceedings*, pp. 7, 2005
- [40] Toonssen R., Aravind P., Smit G., Woudstra N., Verkooijen A.: System study on hydrothermal gasification combined with a hybrid solid oxide fuel cell gas turbine, *Fuel Cells*, vol. 10, no. 4, pp. 643–653, 2010
- [41] Toonssen R., Sollai S., Aravind P., Woudstra N., Verkooijen A.: Alternative system designs of biomass gasification SOFC/GT hybrid systems, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 16, pp. 10414–10425, 2011
- [42] Mounir H., El-Gharad A., Belaiche M., Boukalouch M.: Thermo-fluid and electrochemical modeling of a multi-bundle IP-SOFS – Technology for second generation hybrid application, *Energy Conversion and Management*, 50, pp. 2685–2692, 2009
- [43] Aguiar P., Adjiman C., Brandon N.: Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell: II model-based dynamic performance and control, *Journal of Power Sources*, vol. 147, no. 1, pp. 136–147, 2005
- [44] Celik I. B., Pakalapati S. R.: From a Single Cell to a Stack Modeling, pp. 123–182, in: *In: Modeling Solid Oxide Fuel Cells, Methods, Procedures and Techniques*, Editors: Bove R., Ubertini S., 2008
- [45] Qu Z., Aravind P., Dekker N., Janssen A., Woudstra N., Verkooijen A.: Three-dimensional thermo-fluid and electrochemical modeling of anode supported planar

- solid oxide fuel cell," *Journal of Power Sources*, vol. 195, no. 23, pp. 7787–7795, 2010
- [46] Qu Z., Aravind P., Boksteen S., Dekker N., Janssen A., Woudstra N., Verkooijen A.: Three-dimensional computational fluid dynamics modeling of anode-supported planar SOFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 16, pp. 10209–10220, 2011
 - [47] Singh J. P., Niihara K., Hasselman D. P. H.: Analysis of thermal fatigue behaviour of brittle structural materials, *Journal of Materials Science* 16, pp. 2789–2797, 1981
 - [48] Fergus J. W.: Sealants for solid oxide fuel cells, Review. *Journal of Power Sources* 147, pp. 46–57, 2010
 - [49] Mahapatra M.K., Lu K. Seal glass for solid oxide fuel cells, Review. *Journal of Power Sources* 195, pp. 7129–7139, 2010
 - [50] Bove R., Ubertini S.: Modeling solid oxide fuel cell operation: Approaches, techniques and results, *Journal of Power Sources*, 159, 1, pp. 543–559, 2006
 - [51] Autissier N., Larrain D., Van Herle J., Favrat D.: CFD simulation tool for solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources* 131, pp. 313–319, 2004
 - [52] Zitney S., Prinkey M., Shahnam M., Rogers W.: Coupled CFD and process simulation of a fuel cell auxiliary power unit, in: *Proceedings of the Second International Conference on Fuel Cell Science, Engineering and Technology*, Rochester, NY, June 14–16, pp. 339–345, 2004
 - [53] Secanell M., Wishart J., Dobson P.: Computational Design and Optimization of Fuel Cells and Fuel Cell Systems: A Review, *Journal of Power Sources*, 196, pp. 3690–3704, 2010
 - [54] Yakabe H., Ogiwara T., Hishinuma M., Yasuda I: 3D model calculation for planar SOFC, *Journal of Power Sources*, 102, 1-2, pp. 144–154, 2001
 - [55] Yakabe H., Baba Y., Sakurai T., Satoh M., Hirose I., Yoda Y.: Evaluation of residual stresses in a SOFC stack, *Journal of Power Sources*, 131, 1-2, pp. 278–284, 2004
 - [56] Yakabe H., Baba Y., Sakurai T., Satoh M., Hirose I., Yoda Y.: Evaluation of residual stresses for anode-supported SOFCs, *Journal of Power Sources*, 135, 1-2, pp. 9–16, 2004
 - [57] Selimovic A., Kemm M., Torisson T., Assadi M.: Steady state and transient thermal stress analysis in planar solid oxide fuel cells. *Journal of Power Sources*, 145, 2, pp. 463–469, 2005
 - [58] Nakajo A., Stiller C., Härkegård G., Bolland O.: Modeling of thermal stresses and probability of survival of tubular SOFC. *Journal of Power Sources*, 158, 1, pp. 287–294, 2006
 - [59] Weil K. S., Hardy J. S., Koepfel J. B.: New Sealing Concept for Planar Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of Materials Engineering and Performance* Contents, 15, pp. 427–432, 2006
 - [60] Lin C. K., Chena T. T., Chyou Y. P., Chiang L. K.: Thermal stress analysis of a planar SOFC stack, *Journal of Power Sources*, 164, pp. 238–251, 2007

- [61] Weil K. S., Koeppel J. B.: Thermal stress analysis of the planar SOFC bonded compliant seal design, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33, pp. 3976-3990, 2008
- [62] Weil K. S., Koeppel J. B.: Comparative finite element analysis of the stress-strain states in three different bonded solid oxide fuel cell seal designs, *Journal of Power Sources*, 180 pp. 343-353, 2008
- [63] Lin C. K., Huang L. H., Chiang L. K., Chyou Y. P.: Thermal stress analysis of planar solid oxide fuel cell stacks: Effects of sealing design, *Journal of Power Sources* 192, pp. 515–524, 2009
- [64] Jiang T. L., Chen M. H.: Thermal-stress analyses of an operating planar solid oxide fuel cell with the bonded compliant seal design, *International Journal of Hydrogen Energy*, 34, pp. 8223-8234, 2009
- [65] Fisher K., Seume J.: Impact of the Temperature Profile on Thermal Stress in a Tubular Solid Oxide Fuel Cell, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 6, 1, pp. 1-9, 2009
- [66] Wenning N. L., Sun X., Koeppel B., Stephens E., Khaleel M. A.: Creep Behavior of Glass/Ceramic Sealant and its Effect on Long-Term Performance of Solid Oxide Fuel Cells, *Int. J. Appl. Ceram. Technol.*, 8, 1, pp. 49–59, 2011
- [67] Liu W. N., Sun X., Khaleel M. A.: Effect of creep of ferritic interconnect on long-term performance of solid oxide fuel cell stacks, *Fuel Cells*, 10, 4, pp. 703–717, 2010
- [68] Chiang L. K., Liu H. C., Shiu Y. H., Lee C. H., Lee R.: Thermal stress and thermo-electrochemical analysis of a planar anode-supported solid oxide fuel cell: Effects of anode porosity, *Journal of Power Sources* 195. pp. 1895-1904, 2010
- [69] Serincan M.F., Pasaogullari U., Sammes N. M.: Thermal stresses in an operating micro-tubular solid oxide fuel cell. *Journal of Power Sources* 195, pp. 4905-4914, 2010
- [70] Peksen M.: Patentanmeldung, Brennstoffzellenmodul, DE 102010003643 A1, 2011
- [71] Liu L., Kim G. K., Chandra A.: Modeling of thermal stresses and lifetime prediction of planar solid oxide fuel cell under thermal cycling conditions, *Journal of Power Sources* 195, pp. 2310-2318, 2010
- [72] Blum L., Groß S., Malzbender J., Pabst U., Peksen M., Peters R., Vinke I. C.: Investigation of solid oxide fuel cell sealing behavior under stack relevant conditions at Forschungszentrum Jülich, *Journal of Power Sources*, 196, pp. 7175-7181, 2010
- [73] Peksen M.: A Coupled 3D Thermo-fluid – Thermomechanical Analysis of a Planar Type Production Scale SOFC Stack, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011
- [74] Al-Masri A., Peksen M., Blum L., Stolten D.: A 3D CFD Model for Predicting the Temperature Distribution in a Full Scale SOFC Short Stack under Transient Operating Conditions, *Applied Energy*, 135, pp. 539-547, 2014
- [75] Niewolak L., Wessel E., Singheiser L., Quadackers W. J.: Potential suitability of ferritic and austenitic steels as interconnect materials for solid oxide fuel cells operating at 600 °C, *Journal of Power Sources*, 195, 22, 15, pp. 7600-7608, 2010

- [76] Peksen M., Peters R., Blum L., Stolten D.: Component Design in SOFC Technology: 3D Computational Continuum Mechanics Modelling and Experimental Validation of a Planar Type Pre-heater, 7th Symposium on Fuel Cell Modelling & Experimental Validation, Morges (Lausanne), Switzerland, 2010
- [77] Peksen M., Peters Ro., Blum L., Stolten D.: 3D Coupled CFD/FEM Modelling and Experimental Validation of a Planar Type Air Pre-heater used in SOFC Technology. International Journal of Hydrogen Energy, 36, 11, pp. 6851-6861, 2010
- [78] Peksen M., Peters Ro., Blum L., Stolten D.: Hierarchical 3D Multiphysics Modelling in the Design and Optimisation of SOFC System Components, International Journal of Hydrogen Energy, 36, pp. 4400-4408, 2011
- [79] Peksen M.: Numerical thermomechanical modelling of solid oxide fuel cells, Progress in Energy and Combustion Science, 48, pp. 1-20, 2015
- [80] Hetnarski R. B., M. R. Eslami: Thermal Stresses – Advanced Theory and Applications, pp. 61, 2009
- [81] Boley B. A., Weiner J. H.: Theory of Thermal Stresses, pp. 41, New York, 1960
- [82] Tan, Q.-M.: Dimensional Analysis with case studies in mechanics, pp. 87, Heidelberg, 2011
- [83] Versteeg H K, Malalasekera W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics, THE FINITE VOLUME METHOD, second edition, London, 2007
- [84] Kakac S., Pramuanjaroenkij A., Zhou X.: A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells, Int J Hydrogen Energy, vol. 32, no. 7, pp.761-786, 2007
- [85] Mench MM. Advanced Modelling in Fuel Cell Systems: A Review of Modelling Approaches, in: 18th World Hydrogen Energy Conference 2010 – WHEC 2010, Proceedings, Editors: Stolten D., Grube Th., May 16.-21. 2010, Essen/Germany, p. 89-113, 2010
- [86] Parka J., Lib P., Baea J.: Analysis of chemical, electrochemical reactions and thermo-fluid flow in methane-feed internal reforming SOFCs: Part II-temperature effect. International Journal of Hydrogen Energy, vol. 37, no. 10, pp. 8532–8555, 2012
- [87] Oulmi K., Zitouni B., Moussa H., Abdenebi H., Andreadis G. M.: Total polarization effect on the location of maximum temperature value in planar SOFC. International Journal of Hydrogen Energy, vol. 36, no. 6, pp. 4236-4243, 2011
- [88] Djamel H., Abdenebi H., Zitouni B., Moussa H., Oulmi K.: Thermal field in SOFC fed by hydrogen: Inlet gases temperature effect, International Journal of Hydrogen Energy, vol. 38, no. 20, pp. 8575-8583, 2013
- [89] Laurencin J., Morel B., Bultel Y., Lefebvre-Joud F.: Thermo-Mechanical Model of Solid Oxide Fuel Cell Fed with Methane. Fuel Cells, vol. 6, no. 1, pp. 64-70, 2006
- [90] Abdenebi H., Zitouni B., Djamel H., Ben Moussa H., Oulmi K., Andreadis G. M., Abdessemed S.: SOFC fuel cell heat production: Analysis, Energy Procedia, 6, pp. 643-650, 2011
- [91] Andersson M., Paradis H., Yuan J., Sundén B.: Three dimensional modeling of a solid oxide fuel cell coupling charge transfer phenomena with transport processes and heat generation, Electrochimica Acta, pp. 881–893, 2013

- [92] Al-Masri A.: ENSA - CSZ8 Design, Ermittlung der Temperaturverteilung im 5-Zeller-Stack mit Hilfe der 3D Conjugate Heat Transfer CFD Simulation, interner Projektbericht, FZ-Jülich, ENSA II-IEK3-2011-07, 2011
- [93] Al-Masri A.: SMART - AP 2.2 (2012), Gekoppelte 3D fluiddynamische Analyse im 5-Zeller-Stack zur Ermittlung der Temperaturverteilung, interner Projektbericht, FZ-Jülich SMART-IEK3-2013-01, 2013
- [94] Daun K. J., Beale S. B., Liu F., Smallwood G. J.: Radiation heat transfer in planar SOFC electrolytes, *Journal of Power Sources* 157, pp. 302–310, 2006
- [95] Wang G., Yang Y., Zhang H., Xia W.: 3D model of thermo-fluid and electrochemical for planar SOFC, *Journal of Power Sources* 167, pp. 398–405, 2007
- [96] Damm D. L., Federov A. G.: Spectral radiative heat transfer analysis of the planar SOFC. *J Fuel Cell Sci Technol*, 2, pp. 258–62, 2005
- [97] Ho T. X., Kosinski P., Hoffmann A. C., Vik A.: Effects of heat sources on the performance of a planar solid oxide fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, 35, pp. 4276 – 4284, 2010
- [98] Snyder M. D., Bathe K.-J.: A solution procedure for therm-elastic-plastic and creep problems, *Nuclear Engineering and Design* 64, pp. 49-80, 1981
- [99] ANSYS Help, Appendix C: Data Transfer Mesh Mapping
- [100] Vasechko V.: Thermo-Mechanical Investigations of Reoxidation-Stable Material Concepts for Solid Oxide Fuel Cells, Dissertation, RWTH Aachen, 2014
- [101] Zhao Y.: Thermo-mechanical Properties of Glass-Ceramic Solid Oxide Fuel Cell Sealant Materials, Dissertation, RWTH Aachen, 2013
- [102] Pausch M.: Strukturmechanische FEM-Simulation des thermozyklischen Verhaltens planarer SOFC Stacks, Dissertation, RWTH Aachen, 2012
- [103] Cook R.D., Malkus D.S., Plesha M.E., Witt R.J.: Concepts and Applications of Finite Element Analysis, 4th. Edition, pp. 356, 2002

10 Anhang

10.1 Nomenklatur

Lateinische Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Querschnittsfläche	m^2
b_i	Vektor der Volumenkraftdichte	N/m^3
C_1, C_2	Dehnsteifigkeiten	N/m
C	Verhältnis der Dehnsteifigkeiten	-
c	spezifische Wärmekapazität	$\text{J/kg/}^\circ\text{C}$
dA	infinitesimales Flächenelement	m^2
dA_e	infinitesimales Flächenelement eines finiten Elements	m^2
dV	infinitesimales Volumenelement	m^3
dV_e	infinitesimales Volumenelement eines finiten Elements	m^3
e	spezifische innere Energie	J/kg
E	Elastizitätsmodul	N/m^2
E_{ijkl}	Elastizitätstensor	N/m^2
$f_{i\alpha}$	lokaler Vektor der mechanischen Knotenlasten am Knoten i	N
$F_{i\alpha}$	globaler Vektor der mechanischen Knotenlasten am Knoten i	N
h	spezifische Enthalpie	J/kg
$h_{i\alpha}$	lokaler Vektor der thermischen Knotenlasten am Knoten i	N
$H_{i\alpha}$	globaler Vektor der thermischen Knotenlasten am Knoten i	N
k	Federrate	N/m
$k_{ik\beta\alpha}$	Elementsteifigkeitsmatrix	N/m
$K_{ik\beta\alpha}$	globale Steifigkeitsmatrix	N/m
l	charakteristische Körperlänge	m
L	Körperlänge	m
m	Masse	kg
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
$N_j(x_1, x_2, x_3)$	Interpolationsfunktion am Knoten j	-
p	Druck	Pa

q_i	Wärmeflussvektor	W/m ²
\dot{Q}_g	Vom Gas ausgetauschte Wärmeleistung	W
\dot{Q}_s	Vom Festkörper ausgetauschte Wärmeleistung	W
T	Temperatur	°C
\dot{T}	Aufheizgeschwindigkeit	°C/min
T_M	Schmelztemperatur	°C
$T_{g,aus}$	Gasausströmungstemperatur	°C
$T_{g,ein}$	Gaseinströmungstemperatur	°C
T_{ref}	Spannungsfreie Referenztemperatur	°C
T_s	gemittelte Festkörpertemperatur	°C
$u = u_{11}$	eindimensionale Verschiebung	m
u_i	Verschiebungsvektor	m
u_{ij}	lokaler Vektor der Knotenverschiebungen am Knoten i	m
$U_{k\beta}$	globaler Vektor der Knotenverschiebungen am Knoten k	m
v_i	Geschwindigkeitsvektor	m/s
V_s	Volumen des Festkörpers	m ³
x_1, x_2, x_3	räumliche rechtwinklige kartesische Koordinaten	m

Griechische Formelzeichen

Symbol	Bedeutung	Einheit
α'	tangentialer Wärmeausdehnungskoeffizient	1/°C
α	Sekanten-Wärmeausdehnungskoeffizient	1/°C
δ	Variation	-
δ_{ij}	Kronecker-Symbol	-
Δ	Differenz	-
$\varepsilon = \varepsilon_{11}$	eindimensionale Dehnung	m/m
$\dot{\varepsilon}$	Dehnungsrate	1/s
$\dot{\varepsilon}_{ij}$	Verzerrungsgeschwindigkeitstensor	1/s
ε_{ij}^c	Kriechverzerrungstensor	m/m

ε_{ij}^e	elastischer Verzerrungstensor	m/m
ε_{ij}^p	plastischer Verzerrungstensor	m/m
ε_{ij}^{th}	thermischer Dehnungstensor	m/m
η_1	normierte Differenz zwischen maximaler und minimaler Festkörpertemperatur	-
η_2	normierter maximaler Betrag des Temperaturgradienten	-
θ	Differenz zwischen lokaler Temperatur und Referenztemperatur	°C
Θ	Differenz zwischen maximaler und minimaler Festkörpertemperatur	°C
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/m/°C
λ	Lamésche Konstante	N/m ²
μ	Lamésche Konstante	N/m ²
ν	Querkontraktionszahl	-
ξ	Laufkoordinate	m
ρ	Dichte	Kg/m ³
$\sigma = \sigma_{11}$	Eindimensionale Spannung	MPa
σ_{ij}	Spannungstensor	MPa
τ_{ij}	Reibungsspannungstensor	MPa

10.2 Abkürzungen

APU	Auxiliary Power Unit
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie
CFD	Computational Fluid Dynamics
FC	Brennstoffzelle (Fuel Cell)
FE	Finites Element / Finite Elemente
FEA	Finite Elemente-Analyse
FEM	Finite Elemente-Methode
FSI	Fluid-Struktur-Interaktionen
FV	Finites Volumen / Finite Volumen
FVA	Finite Volumen-Analyse

FVM Finite Volumen-Methode

ITM Intermediate Temperature Metal (Ferritischer Chromstahl der Firma Plansee)

SOFC Oxidkeramische Brennstoffzelle (Solid Oxide Fuel Cell)

10.3 Index-Schreibweise

Bei der Aufstellung der Gleichungen wird die Index Schreibweise verwendet, da sich dadurch die Gleichungen in einer kompakten Form darstellen lassen. Dabei beziehen sich die Indizes auf die Richtungen des dreidimensionalen Kartesischen Raums x_1, x_2, x_3 , weshalb die in den Gleichungen auftretenden Indizes die Werte 1, 2, 3 annehmen können. Ferner wird die partielle Ableitung nach der i -ten Koordinate durch ein Komma vor dem Index gekennzeichnet gemäß

$$\frac{\partial}{\partial x_i} () = ()_{,i} \quad (\text{A1})$$

Weiterhin gilt die Einstein'sche Summationsvereinbarung, wonach über gleiche in einer Gleichung auftretende Indizes summiert wird, wie die nachfolgende Gleichung für die beliebigen Variablen a und b beschreibt.

$$\sum_{i=1}^3 a_i * b_i = a_i * b_i = a_1 * b_1 + a_2 * b_2 + a_3 * b_3 \quad (\text{A2})$$

Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist während meiner Tätigkeit am Institut für Energie- und Klimaforschung – Elektrochemische Verfahrenstechnik (IEK-3) des Forschungszentrums Jülich entstanden.

Meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. Detlef Stolten - Direktor des Instituts und Leiter des Lehrstuhls für Brennstoffzellen an der RWTH Aachen - gilt mein Dank für seine wissenschaftliche Betreuung und Förderung meiner Arbeit.

Prof. Dr.-Ing. Wilfried Becker - Leiter des Fachgebiets Strukturmechanik an der TU Darmstadt - und Prof. Dr.-Ing. Christoph Broeckmann - Leiter des Instituts für Werkstoffanwendungen im Maschinenbau an der RWTH Aachen - danke ich für die Übernahme des Korreferats beziehungsweise des Prüfungsvorsitzes.

Für die Unterstützung und die kritische Durchsicht des Manuskripts bedanke ich mich beim Abteilungsleiter Prof. Ludger Blum und Dr. Murat Peksen, die zusammen mit Herrn Roland Peters durch ihre Erfahrung und ihre konstruktiven Anregungen zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Des Weiteren bedanke ich mich bei meinen Kolleginnen und Kollegen des Instituts für die freundliche Arbeitsatmosphäre und die hilfsbereite Zusammenarbeit.

Mein besonderer Dank gilt Frau Ute Packbier für ihre Motivation und Unterstützung.

Dr. Remzi Can Samsun, Dr. Van Nhu Nguyen, Frau Dr. Dr. Li Zhao, Dr. Alexander Otto danke ich für die wertvollen Hinweise und die hilfreichen Informationen.

Dankbar bin ich auch meinen beiden Patenkindern Aylin S. und Melissa M.C., die mich durch ihre jugendliche Kreativität und Energie unterstützt haben.

Weiterhin danke ich meinen Freunden und meiner Familie, die mich auf meinem Weg begleitet und stets für mich da waren.

Band / Volume 317

**Thermoschockverhalten und temperaturabhängige Eigenschaften
kohlenstoffarmer und -freier Feuerfestwerkstoffe**

A. Böhm (2016), VI, 153 pp

ISBN: 978-3-95806-139-2

Band / Volume 318

**Theoretical and experimental studies of runaway electrons
in the TEXTOR tokamak**

S.S. Abdullaev, K.H. Finken, K. Wongrach, O. Willi (2016), X, 109 pp

ISBN: 978-3-95806-140-8

Band / Volume 319

**Modelling Thermodynamic Properties of Intercalation Compounds
for Lithium Ion Batteries**

S. O. Dang (2016), x, 133 pp

ISBN: 978-3-95806-141-5

Band / Volume 320

Atmospheric Mixing in a Lagrangian Framework

M. Tao (2016), 146 pp

ISBN: 978-3-95806-142-2

Band / Volume 321

**Statistical analysis and combination of active and passive
microwave remote sensing methods for soil moisture retrieval**

K. Rötzer (2016), XIV, 112 pp

ISBN: 978-3-95806-143-9

Band / Volume 322

**Langzeitstabilität der Polymerelektrolyt-Wasserelektrolyse
bei reduziertem Iridiumgehalt**

C. G. Rakousky (2016), VII, 199 pp

ISBN: 978-3-95806-147-7

Band / Volume 323

**Light induced water splitting using multijunction thin film
silicon solar cells**

F. Urbain (2016), xi, 173, XLVI pp

ISBN: 978-3-95806-148-4

Band / Volume 324

**Properties of convective gravity waves derived by
combining global modeling and satellite observations**

Q. T. Trinh (2016), 140 pp

ISBN: 978-3-95806-150-7

Band / Volume 325

**Feasible and Reliable Ab initio Atomistic Modeling
for Nuclear Waste Management**

G. Beridze (2016), xix, 128 pp

ISBN: 978-3-95806-151-4

Band / Volume 326

**Sauerstoffspeicher für die oxidkeramische Batterie:
Herstellung, Charakterisierung und Betriebsverhalten**

C. M. Berger (2016), XV, 128 pp

ISBN: 978-3-95806-154-5

Band / Volume 327

**Institute of Energy and Climate Research IEK-6:
Nuclear Waste Management Report 2013 / 2014**

Material Science for Nuclear Waste Management

S. Neumeier, M. Klinkenberg, D. Bosbach (Eds.)

(2016), 219 pp

ISBN: 978-3-95806-155-2

Band / Volume 328

**Conductivity and Structure of Sputtered ZnO:Al on Flat
and Textured Substrates for Thin-Film Solar Cells**

N. Sommer (2016), vii, 195, XIV pp

ISBN: 978-3-95806-156-9

Band / Volume 329

Glaslotfügen von Festoxid-Brennstoffzellen durch Laseraufschmelzung

M. Willberg (2016), 99 pp

ISBN: 978-3-95806-157-6

Band / Volume 330

**The Role of Natural Nanoparticles and Colloids for
Phosphorus Binding in Forested Headwater Catchments**

N. Gottselig (2016), VIII, 116 pp

ISBN: 978-3-95806-160-6

Band / Volume 331

**Numerische Modellierung der thermomechanischen
Fluid-Struktur-Interaktion im SOFC-Stack**

A. Al-Masri (2016), iii, 165 pp

ISBN: 978-3-95806-161-3

Energie & Umwelt /
Energy & Environment
Band / Volume 331
ISBN 978-3-95806-161-3

